



# Transfert Radiatif hors équilibre thermodynamique local dans les atmosphères d'étoiles supergéantes rouges

Julien Lambert

## ► To cite this version:

Julien Lambert. Transfert Radiatif hors équilibre thermodynamique local dans les atmosphères d'étoiles supergéantes rouges. Astrophysique stellaire et solaire [astro-ph.SR]. Université Montpellier II - Sciences et Techniques du Languedoc, 2012. Français. NNT: . tel-00795445

**HAL Id: tel-00795445**

**<https://theses.hal.science/tel-00795445>**

Submitted on 28 Feb 2013

**HAL** is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

# THÈSE DE DOCTORAT

présentée pour obtenir le grade de  
DOCTEUR DE L'UNIVERSITÉ MONTPELLIER II

**Spécialité : Astronomie – Astrophysique**

par  
Julien LAMBERT

TRANSFERT RADIATIF HORS ÉQUILIBRE  
THERMODYNAMIQUE LOCAL  
DANS LES ATMOSPHÈRES D'ÉTOILES SUPERGÉANTES ROUGES

Soutenue publiquement le 3 décembre 2012 devant le jury composé de :

Agnès LEBRE	Président du Jury
Jean-Marc HURE	Rapporteur
Frédéric PALETOU	Rapporteur
Eric JOSSELIN	Directeur de Thèse
Alexandre FAURE	Examineur
Nils RYDE	Examineur



## RÉSUMÉ

### **Transfert Radiatif hors équilibre thermodynamique local dans les atmosphères d'étoiles supergéantes rouges**

L'eau est un constituant essentiel de l'atmosphère des supergéantes rouges (RSG), dont l'influence reste mal comprise. Le spectre observé de l'eau de ces étoiles ne peut être reproduit que par l'ajout d'une coquille de gaz moléculaire, les MOLsphères. Cependant, l'hypothèse des MOLsphères reste fragile et sujette à caution. Dans le but de mieux interpréter les spectres observés, la synthèse de spectres hors équilibre thermodynamique local est une approche potentiellement importante. Les effets hors ETL étant potentiellement fort, ils pourraient être en mesure de lever les problèmes de l'interprétation des raies de l'eau sans ajout de MOLsphère et impliquer un rôle important dans la dynamique de l'atmosphère. Pour cela, nous avons développé une méthode originale en mesure de résoudre l'équation de transfert pour les nombreuses transitions radiatives de l'eau sans l'approximation ETL. Cette méthode a été mise en oeuvre via le développement d'un code de transfert radiatif parallèle. Les premiers résultats montrent que les effets hors ETL dans l'atmosphère des RSG, et leur impact sur le spectre comme sur certaines observables utilisées pour sonder ces étoiles, sont importants.

## ABSTRACT

### **Non local thermodynamical radiative transfer in red supergiant stellar atmospheres**

Water is an important constituent of the atmosphere of red supergiant stars (RSG), which influence remains however poorly understood. The water spectrum of these stars can apparently be only reproduced through the addition of a detached shell of cool molecular gas, the so-called MOLspheres. However, this hypothesis is still cautious. In order to better interpret observed spectra, non local thermodynamic equilibrium (NLTE) spectrum synthesis may be potentially important. NLTE effects being potentially important, they may alleviate the problems in the interpretation of water spectra, and affect the atmosphere dynamics. We thus developed an original method to solve the radiative transfer equation, adapted to the numerous water transitions and without the LTE approximation. This method has been implemented in an original parallel code. Preliminary results show that NLTE effects in RSG atmospheres and their impact on observables such as the emergent spectrum are very important.





## REMERCIEMENTS

Au moment où je termine les lignes de ce manuscrit, je prends conscience du plaisir aussi bien personnel que professionnel dont j'ai fait l'expérience durant ces trois années. Cela est grandement liée au personnel du laboratoire dans lequel j'ai commencé cette thèse, à savoir le GRAAL puis l'équipe physique stellaire du LUPM et en particulier mon directeur de thèse Eric Josselin. Je ne souhaite pas ici lui faire des remerciements cordiaux tel qu'il est d'usage, mais lui exprimer le plus sincèrement qu'il soit possible de le faire, ma gratitude et lui dire le plaisir aussi bien scientifique que personnel que j'ai tiré de cette collaboration. Je tiens à le remercier pour la manière dont il a dirigé cette thèse, en me laissant une grande liberté scientifique tout en restant présent et attentif au bon déroulement de ce travail.

Un grand merci à Nicolas Fabas, Ana Palacios, Fabrice Martins, Dimitri Douchin, Pierre Ghesquières et Louis Amard d'avoir partagé avec moi des bons moments, dans mon bureau comme autour d'un verre, d'une balade en canoë ou ailleurs. Ce fut un réel plaisir de les avoir connus et d'avoir partagé ces moments de convivialité avec eux. Je remercie aussi les personnels administratifs qui m'ont apporté un grand soutien durant ces trois ans, et tout particulièrement Carol Prévôt, et Charlotte Léon.

Je tiens aussi à remercier les membres de mon jury, Jean-Marc Huré et Frédéric Paletou pour avoir accepté de rapporter cette thèse, Alexandre Faure et Nils Ryde pour l'avoir examiné, et Agnès Lèbre d'avoir présidé ce jury. Un grand merci aussi à Dahbia Talbi d'avoir accepté la présidence de mon comité de thèse.

Je ne peu oublier de mentionner et de remercier le CIES de Montpellier pour leur apport considérable à ma diction grâce au stage de plusieurs jours de BA-BE-BI-BO-BU, enrichissant aussi ma culture, ma manière d'être et de m'exprimer.



# TABLE DES MATIÈRES

RÉSUMÉ . . . . .	1
REMERCIEMENTS . . . . .	3
TABLE DES MATIÈRES . . . . .	5
INTRODUCTION . . . . .	7

## I – CONTEXTE ASTROPHYSIQUE

CHAPITRE I : MOLÉCULES ET ÉTOILES FROIDES . . . . .	13
<b>I.1 Les supergéantes rouges . . . . .</b>	<b>15</b>
<i>I.1.1 Intérêt des étoiles massives . . . . .</i>	<i>15</i>
<i>I.1.2 Caractéristiques physiques des RSG . . . . .</i>	<i>15</i>
<b>I.2 Les molécules dans les étoiles évoluées . . . . .</b>	<b>26</b>
<i>I.2.1 Les molécules dans la photosphère . . . . .</i>	<i>26</i>
<i>I.2.2 Les molécules dans l'enveloppe circumstellaire . . . . .</i>	<i>28</i>
<b>I.3 Cas de H<sub>2</sub>O . . . . .</b>	<b>30</b>
<i>I.3.1 Les MOLsphères . . . . .</i>	<i>30</i>
<i>I.3.2 Donnée moléculaires . . . . .</i>	<i>34</i>
CHAPITRE II : TRANSFERT RADIATIF . . . . .	41

<b>II.1</b>	<b>Equation de transfert</b>	44
II.1.1	<i>Intensité spécifique</i>	44
II.1.2	<i>Coefficients monochromatiques</i>	46
II.1.3	<i>Équation de Transfert</i>	52
II.1.4	<i>Solution formelle</i>	55
<b>II.2</b>	<b>Aspects hors ETL</b>	58
II.2.1	<i>Équilibre statistique</i>	59
II.2.2	<i>Conditions physiques et densité critique</i>	61
II.2.3	<i>Non-localité et non-linéarité</i>	62
<b>II.3</b>	<b>Méthodes de résolution classique</b>	63
II.3.1	<i>Probabilité d'échappement</i>	63
II.3.2	<i>ALI: Jacobi, Gauss-Seidel, SOR</i>	67

## II – NOUVELLE MÉTHODOLOGIE

CHAPITRE III : MÉTHODE . . . . .	75
<b>III.1      Formulation analytique . . . . .</b>	<b>78</b>
III.1.1 <i>Changement de variable . . . . .</i>	78
III.1.2 <i>Formulation analytique de <math>\bar{\mathcal{J}}_{ij}(\tau_V)</math> . . . . .</i>	79
III.1.3 <i>Contributions à <math>\bar{\mathcal{J}}</math> . . . . .</i>	81
<b>III.2      Équilibre statistique . . . . .</b>	<b>83</b>
III.2.1 <i>Forme matricielle . . . . .</i>	83
III.2.2 <i>Équilibre statistique multi-zones . . . . .</i>	84
<b>III.3      Matrice Jacobienne . . . . .</b>	<b>85</b>
III.3.1 <i>Dérivées du champ moyen . . . . .</i>	87
III.3.2 <i>Dérivées locales du champ moyen . . . . .</i>	89
<b>III.4      Propriétés de la solution . . . . .</b>	<b>90</b>

III.4.1	<i>Unicité et positivité de l'équilibre statistique local</i>	91
III.4.2	<i>Questions ouvertes</i>	95
CHAPITRE IV : IMPLÉMENTATION NUMÉRIQUE		97
IV.1	<b>MOrad</b>	100
IV.1.1	<i>Modèle d'atmosphère</i>	100
IV.1.2	<i>Données moléculaires</i>	100
IV.2	<b>Parallélisation</b>	101
IV.2.1	<i>Scalabilité</i>	102
IV.2.2	<i>Implémentation</i>	104
IV.3	<b>Intégration numérique</b>	108
IV.3.1	<i>Principe de la méthode des périodisations</i>	108
IV.3.2	<i>« Split » de l'intégrale</i>	111
IV.3.3	<i>Profil de raie</i>	114
IV.3.4	<i>Résultats</i>	114

## III – RÉSULTATS

CHAPITRE V : RÉSULTATS		119
V.1	<b>Populations</b>	121
V.1.1	<i>Résultats</i>	121
V.1.2	<i>Interprétation</i>	122
V.2	<b>Spectre</b>	124
V.2.1	<i>Spectre synthétique : ETL vs hors ETL</i>	124
V.2.2	<i>Effets systématiques</i>	128
V.3	<b>Fonction de refroidissement</b>	131
V.3.1	<i>Taux de refroidissement</i>	131

	<i>V.3.2</i>	<i>Résultat</i>	131
<b>V.4</b>		<b>Pression de radiation</b>	132
CONCLUSION & PERSPECTIVE			135
<b>V.5</b>		<b>Les développements futurs</b>	135
	<i>V.5.1</i>	<i>Les ingrédients physiques</i>	135
	<i>V.5.2</i>	<i>Les aspects numériques</i>	137
BIBLIOGRAPHIE			147

## INTRODUCTION

Les supergéantes rouges (RSG) sont la phase évoluée des étoiles massives intermédiaires ( $10M_{\odot} \lesssim M_{\star} \lesssim 25M_{\odot}$ ) et donc les progéniteurs de la plupart des supernovae de type II.

Ces étoiles sont affectées par une perte de masse importante (taux jusqu'à  $10^{-4} M_{\odot}/\text{an}$ ), qui joue donc un rôle-clé dans leur évolution. Le processus d'éjection reste cependant incompris à ce jour. Plusieurs hypothèses (ondes acoustiques, ondes d'Alfvén) ont été avancées, mais aucune n'a pu être validée. Josselin & Plez (2007) ont montré que les molécules pourraient jouer un rôle dans la perte de masse des RSG.

Dans la longue liste des problèmes d'interprétation des observations des RSG, la spectroscopie de l'eau occupe actuellement une place privilégiée. Le problème a émergé à la fin des années 1990, sur la base de spectres (à basse résolution spectrale) obtenus avec le satellite ISO autour de  $2 \mu\text{m}$ . Les bandes de l'eau sont plus fortes que ce que prédisent des modèles 1D statiques. Afin de reproduire ces spectres, Tsuji (2000) a supposé de manière ad hoc l'existence d'une coquille quasi-statique de gaz moléculaire au-dessus de la photosphère ( $T \sim 1500 - 2000 \text{ K}$ ,  $R \sim 1.5 - 2 R_{\star}$ ), baptisée MOLsphères. L'existence de ces coquilles a par la suite été corroborée par les observations interférométriques, qui révèlent que le rayon des RSG est significativement plus grand dans les bandes de l'eau que dans le continu. Néanmoins aucune modélisation même qualitative, ne permet d'expliquer leur formation. Surtout, à partir des paramètres de ces MOLsphères, on prédit des raies de l'eau à  $12 \mu\text{m}$  en émission alors que les observations ont montré qu'elles sont en absorption. L'interprétation des raies de l'eau reste donc à faire.

Dans ce cadre, il est utile de s'interroger sur les hypothèses communément admises dans la modélisation des atmosphères de RSG et leur impact sur l'interprétation que l'on a de ces objets. On peut citer trois de ces hypothèses potentiellement inadéquates



dans ces étoiles :

1. La géométrie 1D incompatible avec la convection à grande échelle dans ces étoiles et ayant des conséquences importantes sur l'interprétation des spectres et des observations interférométriques. Les aspects 3D sont donc un enjeu majeur de la compréhension de ces objets.
2. L'hypothèse statique, en contradiction avec les champs de vitesse importants dans l'atmosphère, qui jouent probablement un rôle dans la perte de masse et dans la structure de l'atmosphère.
3. Le transfert radiatif, avec l'hypothèse de l'équilibre thermodynamique local (ETL), qui n'est a priori pas justifiée dans l'atmosphère très peu dense des RSG et ayant un champ de rayonnement très important.

Cette thèse avait pour ambition de mesurer l'importance des effets hors ETL dans le traitement du transfert radiatif et de développer une méthode ainsi que des outils en mesure de quantifier ces effets sur un certain nombre d'observables. Elle a montré que ces effets peuvent au moins en partie expliquer la sur-absorption des bandes de l'eau autour de  $2\ \mu\text{m}$  sans ajout d'une MOLsphère et ouvre la voie à une meilleure interprétation des observations interférométriques en montrant que des effets hors ETL forts peuvent avoir des conséquences sur la dilution de l'atmosphère et l'écart entre la zone de formation des raies de l'eau et du continu, expliquant ainsi les observations interférométriques sans MOLsphère.

Dans un premier temps (chapitre I), nous exposerons en quoi la compréhension des processus physiques à l'oeuvre au sein des supergéantes rouges constitue un enjeu important de l'astrophysique actuelle et quels sont ceux qui sont toujours mal compris.

Dans le but de répondre à ces questions sous l'angle du transfert radiatif, nous développerons par la suite le formalisme ainsi que les méthodes classiques de résolution du transfert et les difficultés liées à la relaxation de l'hypothèse d'équilibre thermodynamique local (chapitre II).

Nous introduirons dans le chapitre III la méthode utilisée pour résoudre ce problème dans le cadre d'un système de grande taille, et la manière de résoudre numériquement celui-ci, ainsi que les techniques et la structure de l'application permettant de la mettre en œuvre au travers d'un code numérique parallèle baptisé MOrad (chapitre IV).

Enfin, nous exposerons les premiers résultats obtenus dans le chapitre V et discuterons de l'impact des effets hors ETL mis en évidence au travers de quelques observables, comme le spectre ou les largeurs équivalentes des raies de l'eau, et les conséquences sur la structure atmosphérique, via par exemple la fonction de refroidissement.

Pour conclure, nous discuterons des possibilités d'améliorer la mise en œuvre de cette méthode dans MOrad, ainsi que des applications physiques auxquelles elle pourrait contribuer (chapitre V.4).



Première partie

Contexte Astrophysique



# MOLÉCULES ET ÉTOILES FROIDES

*« Le poète fait abstraction de la réalité,  
alors, ce rêveur compte les étoiles et va même jusqu'à les imaginer. »*

**GIACOMO BARDI**

CHAPITRE I : MOLÉCULES ET ÉTOILES FROIDES	13
<b>I.1 Les supergéantes rouges</b>	15
I.1.1 Intérêt des étoiles massives	15
I.1.2 Caractéristiques physiques des RSG	15
<b>I.2 Les molécules dans les étoiles évoluées</b>	26
I.2.1 Les molécules dans la photosphère	26
I.2.2 Les molécules dans l'enveloppe circumstellaire	28
<b>I.3 Cas de H<sub>2</sub>O</b>	30
I.3.1 Les MOLsphères	30
I.3.2 Donnée moléculaires	34



## I.1 Les supergéantes rouges

### I.1.1 Intérêt des étoiles massives

Les étoiles massives ( $M_{\star} > 10M_{\odot}$ ) jouent un rôle clé en astrophysique. En effet, elles synthétisent une grande quantité d'éléments chimiques lourds (C,N,O,...) et contribuent de ce fait à l'enrichissement chimique de la Galaxie. Les éléments présents au sein de ces étoiles, qu'il s'agisse d'éléments simples sous forme atomique ou plus complexes comme les molécules présentes dans les étoiles froides vont être disséminés dans le milieu interstellaire par deux mécanismes : les vents très importants de ces étoiles, mais aussi lors de l'explosion de celles-ci, car elles sont les progéniteurs des supernovae de type II ou Ib/c.

La contribution des étoiles massives ne s'arrête pas là. Elles sont la principale source de rayonnement UV ionisant de la galaxie et, en ce qui concerne les supergéantes rouges, elles contribuent de manière déterminante au rayonnement infrarouge au travers du chauffage des poussières dont elles sont, avec les étoiles AGB (Asymptotic Giant Branch), l'une des principales sources. Par ailleurs, les supergéantes rouges sont utilisées comme des sondes de la structure galactique, voire des indicateurs potentiels de distance intergalactique.

Pour toutes ces raisons, l'étude et la compréhension de ces objets est un enjeu majeur dans de nombreux domaines de l'astrophysique actuelle.

### I.1.2 Caractéristiques physiques des RSG

Les supergéantes rouges (RSG, Red SuperGiant) sont la phase évoluée des étoiles massives intermédiaires ( $10M_{\odot} \lesssim M_{\star} \lesssim 25M_{\odot}$ ). Ces étoiles, initialement bleues sur la séquence principale, ont traversé rapidement le diagramme Hertzsprung Russell (HR), sous une forme intermédiaire de supergéantes jaunes. Elles sont donc dans une



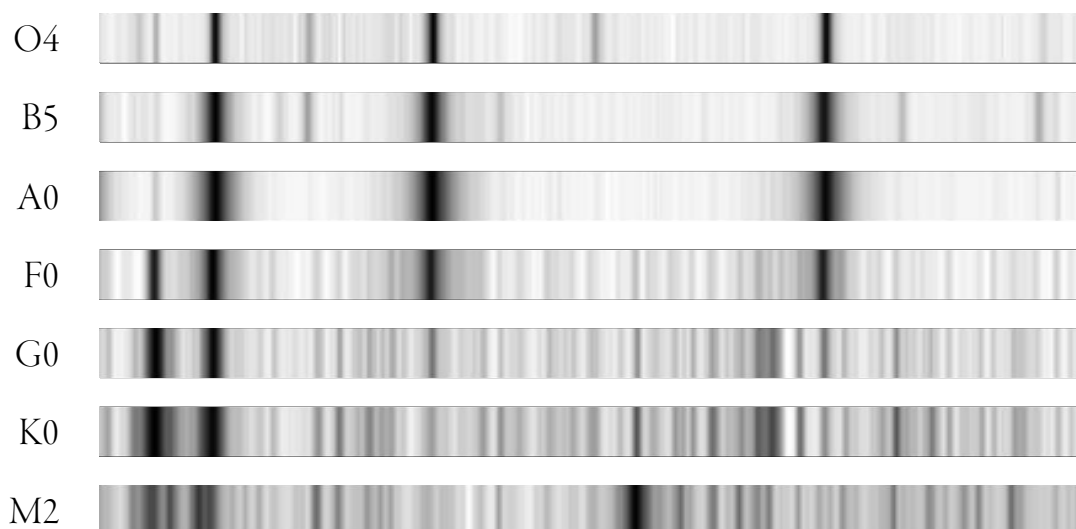
phase où elles brûlent leur hélium en leur coeur. Pour dissiper l'énergie produite, le rayon de ces dernières augmente et leur température effective diminue (entre 3500-4000 K). Elles se retrouvent ainsi proche de la limite d'Hayashi, où elles vont subsister une longue partie de leur vie ( $\sim 10^6$  ans pour une étoile de  $15 M_{\odot}$ ), en gagnant en luminosité (voir Conti, 1975 et Massey, 2003). Dans certains cas, elles vont repartir vers le bleu, repassant par le stade supergéante jaune, ou devenir des Wolf-Rayet, en fonction de leur masse initiale, de leur métallicité et de leur taux de perte de masse. Elles vont ensuite exploser en supernovae de type II. (voir Maeder, 2009).

La faible température dans leurs atmosphères fait qu'elles sont riches en molécules. En effet, cette température est inférieure à l'énergie de dissociation d'un grand nombre de molécules, permettant ainsi de former dans un premier temps des hydrures (CH, MgH, ...) puis des oxydes comme le TiO ou le CO et des molécules plus complexes, en particulier des molécules triatomiques comme  $H_2O$ .

Cette richesse en molécules implique que le spectre est dominé par les raies d'absorption moléculaire et place les RSG dans la catégorie des étoiles M ou K de la classification spectrale.

Enfin, leur diamètre considérable, environ  $\sim 500 - 1500 R_{\odot}$  (voir Levesque et al., 2005), fait que leur densité moyenne est très faible et leur atmosphère très étendue. La gravité de surface de ces étoiles est donc très faible et leur  $\log g$  est proche de 0 (CGS).

Néanmoins comme nous allons le voir, les propriétés physiques des supergéantes rouges restent mal connues et sont donc un enjeu majeur de la physique stellaire. L'intérêt de leur étude réside en particulier dans la mise à l'épreuve qu'elles imposent aux modèles d'évolution, d'atmosphère, ou la classification spectrale actuelle, mais aussi à l'interprétation des observations, qu'elles soient spectroscopiques, interférométriques ou spectropolarimétriques.



**FIGURE I.1** – Spectres d'étoile de différentes classes. On voit en particulier que le spectre des étoiles K/M est dominé par les bandes d'absorption moléculaire.

**Position dans le diagramme HR** La première difficulté dans la détermination des paramètres fondamentaux de ces étoiles est de constituer des échantillons qui soient effectivement constitués de supergéantes rouges. Cette difficulté est liée à de nombreux facteurs. Le premier d'entre eux est la dégénérescence masse-luminosité des parcours évolutifs proches de la limite d'Hayashi, où se mélangent dans une même zone des étoiles de masses très différentes (voir Brunish et al., 1986). On peut donc difficilement différencier les AGB les plus lumineuses, les super-AGB, et les RSG peu lumineuses. D'autre part, pour les RSG extragalactiques, il n'est pas aisé de différencier les RSG des naines rouges d'avant plan. Néanmoins Massey (1998) a montré que l'on pouvait discriminer les populations de forte et de faible gravité de surface à l'aide de diagrammes couleur-couleur  $(B - V)$  vs.  $(V - R)$ . En effet, le nombre de raies faibles dans la bande  $B$  augmente dans les étoiles à faible gravité modifiant de ce fait le « *line blanketing* »<sup>1</sup> et donc l'indice de couleur  $(B - V)$ .

1. L'opacité des nombreuses raies augmente la température des couches profondes (sous les couches où la majorité des raies se forment) et refroidit donc les couches les plus externes.

D'autre part, malgré la constitution d'échantillons fiables, on se rend vite compte que la détermination des paramètres fondamentaux est un challenge aussi bien pour la classification spectrale que pour les modèles d'évolution ou d'atmosphère. Ainsi, dans un premier temps, l'échantillon de Humphreys (1978) positionnait les supergéantes rouges au delà de la zone d'Hayashi prédite par les modèles d'évolution. Cette incohérence entre modélisation et observation est liée à deux causes principales : La considérable difficulté à déterminer précisément  $T_{\text{eff}}$ , et la spécificité de la structure et de la dynamique de ces étoiles qui en font des cas difficiles à traiter pour les modèles d'évolutions.

En ce qui concerne le premier point, à savoir l'importance d'une détermination précise de  $T_{\text{eff}}$ , on peut évoquer la très forte dépendance entre la température effective et la correction bolométrique. Ainsi 10% d'erreur sur  $T_{\text{eff}}$  implique un facteur 2 d'erreur sur la luminosité bolométrique (voir Kurucz, 1992 et Massey & Olsen, 2003). On comprend dès lors que la détermination précise de la température est un point crucial.

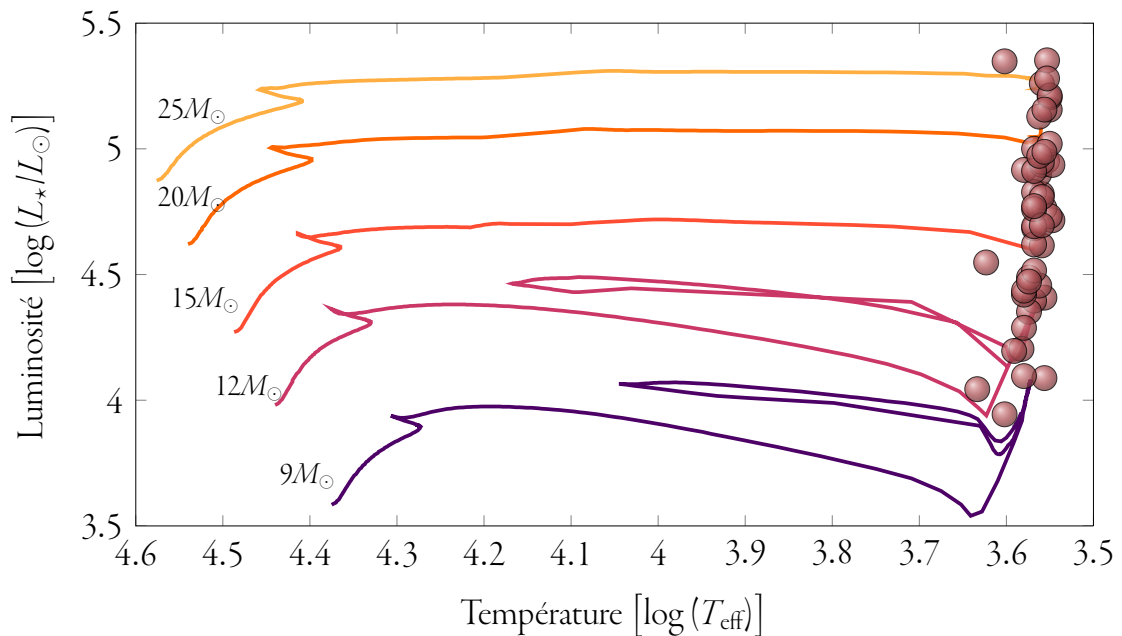
Mais cette détermination se heurte à un certain nombre de difficultés. En premier lieu, construire une échelle fiable en température basée sur la classification spectrale se révèle très difficile, à la fois car cela nécessite une détermination fiable du rayon, ce qui s'avère compliqué (voir Harper et al., 2001), et d'autre part, parce que la domination des bandes de TiO dans l'optique fait que classe spectrale et température ne sont pas des variable bijectives. Ainsi pour une même température, la sensibilité des bandes de TiO à la métallicité produit des types spectraux différents (voir Massey & Olsen, 2003 et Levesque et al., 2006).

On doit donc s'appuyer sur les modèles d'atmosphère, et déterminer les températures par ajustement de spectres synthétiques sur des spectres observés. Ainsi Levesque et al. (2005) ont déterminé les températures et correction bolométrique d'un échantillon de RSG en se basant sur des modèles MARCS<sup>2</sup> (voir Gustafsson et al., 2008).

---

2. Modèles faisant l'hypothèse d'une atmosphère 1D (plan parallèle ou sphérique) à l'équilibre hydrostatique,

Notons cependant que la détermination des températures en utilisant la synthèse spectrale donne des résultats très différents selon que l'on ajuste les spectres dans l'optique ou dans l'infrarouge ( $\Delta T \sim 400$  K). Or, il n'y a pas de raison évidente qui justifierait qu'une de ces températures soit plus valable que l'autre. Il semble néanmoins que ce choix soit fait au profit des températures déduites du spectre visible. En revanche, ces différences révèlent des faiblesses dans les modèles d'atmosphère et dans le traitement du transfert radiatif, faiblesses qu'il reste à déterminer, quantifier, et mettre en œuvre dans ces modèles.

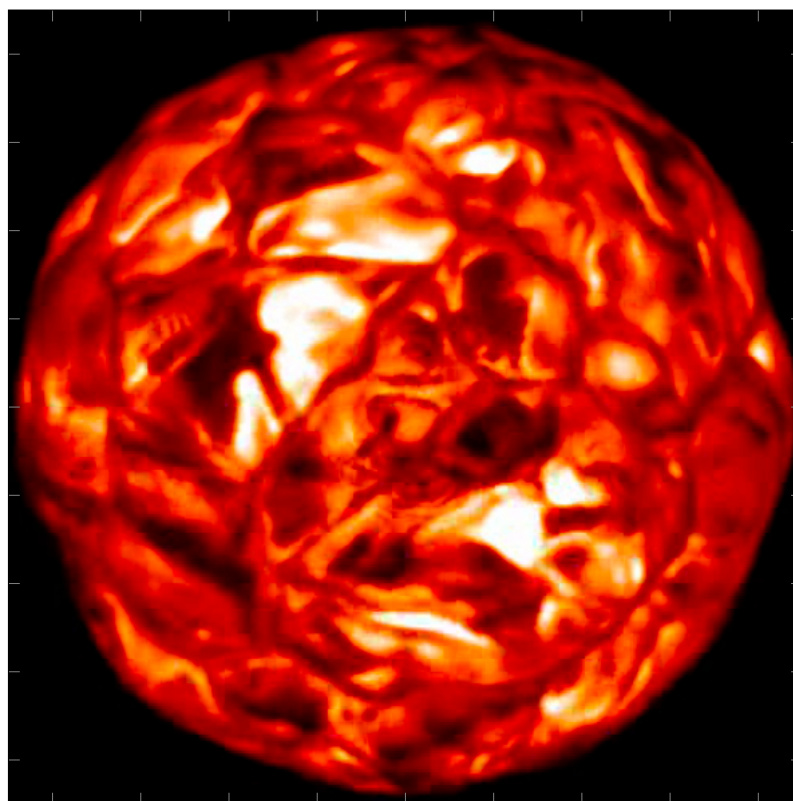


**FIGURE I.2** – Positions de RSG observées et dont les paramètres fondamentaux ont été déterminés par Levesque et al. (2006). Les tracés d'évolution sont issus du modèle de Genève (voir Meynet & Maeder, 2000) pour une métallicité solaire, et sans rotation.

Comme nous l'avons évoqué plus haut, l'incohérence entre la position des RSG dans le diagramme HR et les tracés évolutifs sont le résultat de la difficulté des modèles d'évolution à inclure les spécificités des RSG. Les vitesses supersoniques dans la zone avec un traitement de la convection par la théorie de la longueur de mélange, ainsi que l'hypothèse de l'équilibre thermodynamique local. Le traitement des opacités est fait via la méthode de l'« *opacity sampling* ».

convective mises en évidence par Josselin & Plez (2007) sur la base de suivis spectroscopiques et en accord avec les simulations hydrodynamiques radiatives 3D de Freytag et al. (2002), ainsi que la taille des cellules de convection générant des asymétries, rendent l'hypothèse de la longueur de mélange des modèles 1D inappropriée. On peut aussi citer la prise en compte de la rotation. De plus, l'extension de l'atmosphère, sa faible température, ainsi que la précision des données moléculaires (opacité, taux de collision, ...), font qu'il est difficile d'inclure tous les effets (3D, hors ETL, dynamique, ...) de manière fiable et précis, et d'obtenir des tracés évolutifs correctement positionnés dans le diagramme HR.

**Dynamique de l'atmosphère** La dynamique des RSG est probablement un élément clé dans la compréhension d'un grand nombre de phénomènes. Les observations de Haubois et al. (2009) et les simulations de Freytag et al. (2002) ont montré les asymétries, et les forts champs de vitesse dans la photosphère comme dans l'enveloppe (voir Josselin & Plez, 2007) en accord avec les prédictions théoriques d'une convection de grande échelle par Schwarzschild (1975) (voir figure I.3). Les effets physiques assujettis à des constantes de temps du même ordre de grandeur que ces effets dynamiques ne sont donc pas pris en compte. On pense par exemple à la chimie hors équilibre mise en évidence dans le soleil pour des molécules comme le CO par Asensio Ramos et al. (2003) et Wedemeyer-Böhm et al. (2005). D'autre part, la structure très asymétrique et hétérogène des RSG font que les modèles d'atmosphère 1D et statiques reproduisent probablement assez mal la physique en jeu dans ces étoiles. Cette dynamique de l'atmosphère peut avoir des effets importants sur la dilution de l'atmosphère, sa géométrie et donc les hypothèses nécessaires à la synthèse des spectres via le transfert radiatif, ou l'interprétation des observations interférométriques. Ajoutons que comprendre la dynamique de ces objets est une étape clé de l'évaluation des taux de perte de masse de ces étoiles.



**FIGURE I.3** – *Simulation d'hydrodynamique radiative 3D de  $\alpha$  Ori réalisée avec l'application COSBOLD de Freytag et al. (2002). On y voit les cellules de convection géantes prédites par Schwarzschild (1975), et à l'origine des asymétries observées en interférométrie par Haubois et al. (2009)*

**Perte de Masse** Un des aspects fondamentaux de la physique des supergéantes rouges est la perte de masse. En effet, comme pour les AGB (voir Habing & Olofsson, 2003), les forts taux de perte de masse qu'elles subissent sont un élément déterminant, voire prédominant de leur évolution, comme de leur capacité à enrichir le milieu inter-stellaire.

Pour ce qui est des RSG, ces étoiles ont un taux de perte de masse de l'ordre de  $\dot{M} \simeq 10^{-7} M_{\odot}/\text{an}$  mais pouvant aller jusqu'à  $10^{-4} M_{\odot}/\text{an}$  pour VY CMa par exemple (voir Mauron & Josselin, 2011). Les vitesses d'éjection sont elles de l'ordre de

$15 - 40 \text{ km.s}^{-1}$  pour les RSG alors que dans les AGB on trouve des vitesses de l'ordre de  $10 - 20 \text{ km.s}^{-1}$ .

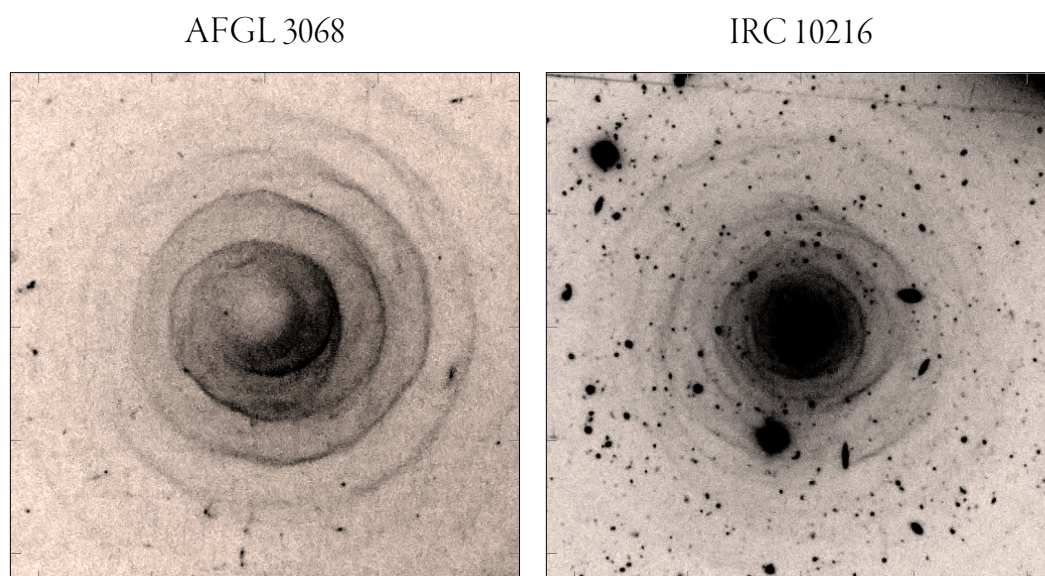
Pour bien se rendre compte de la colossale perte de masse que cela représente, on peut dire qu'une étoile comme VY CMa, la plus grosse (à défaut d'être la plus massive) perdrait la totalité de sa masse en seulement 10000 ans ce qui n'est absolument rien par rapport aux échelles de temps de l'évolution de ces dernières. On comprend dès lors pourquoi la perte de masse la domine.

Trois principaux processus sont en mesure de générer un vent, cause du mécanisme de perte de masse.

- Les vent coronaux c'est à dire des vents résultant du chauffage de la couronne dont le prototype est le vent solaire, mais qui génère des taux de perte de masse très faibles  $\dot{M} \simeq 10^{-14} M_{\odot}/\text{an}$  et des vitesses extrêmement grandes (400 à 600  $\text{km.s}^{-1}$ ).
- Les vents purement radiatifs qui sont le fruit de la pression de radiation très importante qu'exerce une étoile chaude sur le gaz (eg. étoiles O ou WR).
- Les vent hybrides résultant d'un processus double, à savoir un mécanisme d'éjection capable de propulser du gaz au-dessus de l'atmosphère, mais avec une vitesse en deçà de la vitesse de libération ne permettant donc pas d'expliquer à lui seul la perte de masse ; et un mécanisme d'accélération de ce gaz, permettant d'obtenir la vitesse suffisante pour qu'il s'échappe.

Ce sont des mécanismes hybrides qui sont à l'oeuvre dans les étoiles froides évoluées. Dans les AGB, qui sont des étoiles pulsantes, les chocs générés lors de la pulsation éjectent le gaz au dessus de l'atmosphère au delà de la zone de nucléation des grains de poussière. Ces poussières ayant une grande opacité au rayonnement, elles subissent une pression de radiation importante, qui leur donne une forte quantité de mouvement, qui va être transmise au gaz par friction permettant ainsi d'accélérer ce dernier au-delà

de la vitesse de libération.



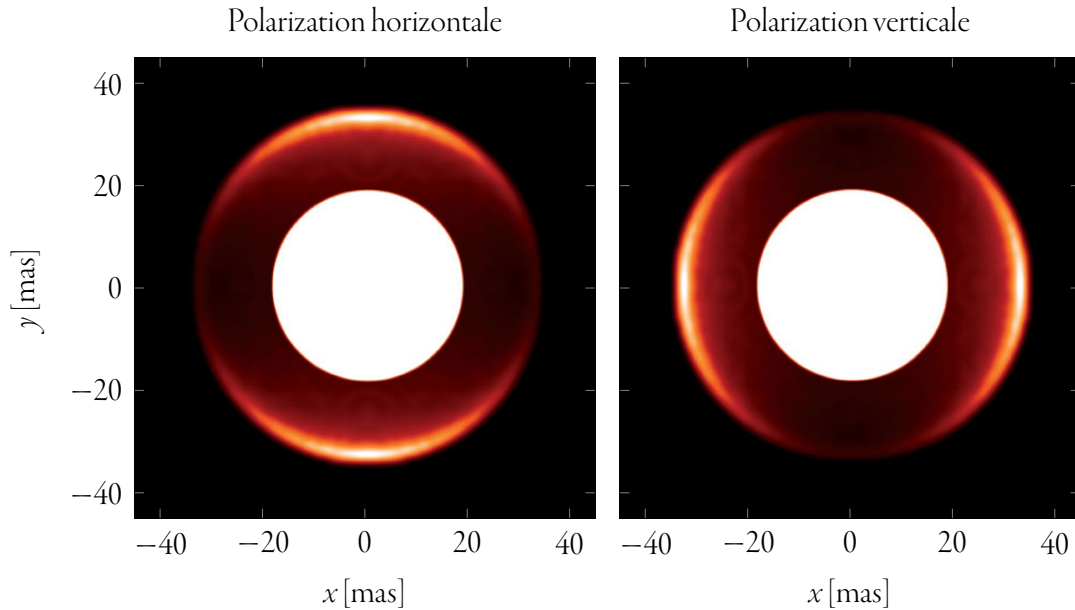
**FIGURE I.4** – Images HST de AFGL 3068 (voir Mauron & Huggins, 2006) et VLT de IRC+10216 (voir Mauron & Huggins, 1999) illustrant la perte de masse des AGB carbonées. La structure spirale de AFGL3068 est liée à la binarité de cet objet.

Ce paradigme admis pour les AGB n'est cependant bien compris que dans le cas des étoiles carbonées qui forment des grains de carbone amorphe ou graphite, à partir d'une chimie incluant des carbures. Les AGB oxygénées, elles, peuvent éjecter le gaz au dessus de l'atmosphère, mais les grains qui se forment suffisamment près de l'étoile sont des silicates non ferreux, ayant une opacité trop faible pour être efficacement accélérés par la pression de radiation (voir Höfner, 2007).

Néanmoins ce problème est depuis peu en voie d'être résolu. Tout d'abord, si l'on considère une chimie hors-équilibre, il serait possible de former des grains carbonés dans les étoiles oxygénées (voir Höfner & Andersen, 2007). De plus, des grains de grande taille ( $\sim 1 \mu\text{m}$ ) peuvent être suffisamment sensibles au « *scattering* » pour rendre le processus d'accélération efficace. Cela supposerait cependant que l'on soit en mesure de quantifier finement cette diffusion, qui doit être élastique s'il s'agit de diffu-



sion Rayleigh ou de Mie, et qui implique donc que le bilan de quantité de mouvement transmis soit issu d'une anisotropie de cette diffusion et donc d'un traitement fin du transfert. Ajoutons par ailleurs que cela nécessiterait d'inclure les phénomènes de polarisation.



**FIGURE I.5** – *Modèle de W Hya extrait de Norris et al. (2012), dans deux états de polarisation linéaire, incluant la diffusion Mie sur des grains de silicates. L’ajustement de ce modèle sur des observations interférométriques prédissent des gros grains de l’ordre de  $\sim 0.3 \mu\text{m}$ .*

Cette hypothèse a obtenu une confirmation observationnelle, avec la mise en évidence de l’existence de ces gros grains autour d’une étoile oxygénée, W Hya (voir Norris et al., 2012). Notons, malgré l’importance de ce résultat, qu’une seule observation ne permet pas de conclure que toutes les étoiles oxygénées forment des grains de silicate de l’ordre de  $\sim 1 \mu\text{m}$ . Cela ouvre en revanche une voie de recherche très intéressante que ce soit l’observation ou la quantification fine des mécanismes de formation et d’accélération que subissent ces grains, sans compter les défis techniques en transfert radiatif.

Néanmoins, les mécanismes proposés pour les AGB (éjection du gaz et accélération via les poussières), n'est pas transposable aux RSG. En premier lieu parce que, bien que variables, les échelles de temps et amplitudes des variations des RSG sont un ordre de grandeur inférieurs à celles des AGB (voir Josselin & Plez, 2007). Dès lors, les vitesses mises en jeu ne permettent pas d'éjecter le gaz suffisamment loin, pour atteindre la zone de formation des poussières, bien plus éloignée que pour les AGB (voir Danchi et al., 1994). Ainsi le rayon interne de la coquille de poussière se trouve à  $3R_*$  pour un prototype d'AGB oxygénée comme  $\alpha$  Cen, alors qu'il se trouve à  $40R_*$  pour le prototype des RSG  $\alpha$  Ori. De plus ces étoiles étant oxygénées, cela pose les mêmes interrogations sur la nature des grains que pour les AGB oxygénées. On peut dès lors s'interroger sur les mécanismes en jeu dans les RSG qui permettent d'éjecter le gaz et le mécanisme permettant de l'accélérer, et suggérer qu'il doit être différent de ce que l'on sait des AGB.

Pour ce qui est de l'éjection initiale, on peut postuler deux hypothèses, les ondes d'Alfvén, et les ondes acoustiques. Pour ce qui est des ondes d'Alfvén, il semble que le milieu soit trop neutre pour les propager, et donc l'amortissement trop rapide pour être efficace (voir Harper, 2010). Mais l'intérêt des ondes d'Alfvén reste entier car on a découvert récemment des champs magnétiques sur  $\alpha$  Ori (voir Aurière et al., 2010). Pour les ondes acoustiques en revanche, les observations de Josselin & Plez (2007), et les simulations d'hydrodynamique radiatives de Freytag et al. (2002) mettent en évidence des ondes de choc supersoniques permettant d'obtenir des vitesses d'éjection certes inférieures à la vitesse de libération, mais néanmoins en mesure de remplir le rôle que tiennent les pulsations dans les AGB.

Pour ce qui est du mécanisme d'accélération du vent, les supergéantes rouges étant très lumineuses (plus que les AGB) et riches en molécules, nous suggérons ici, suivant l'hypothèse de Josselin & Plez (2007), que la pression de radiation sur ces molécules pourrait jouer un rôle important, comme le font les grains dans les AGB, rôle qu'il reste

à quantifier.

C'est dans cet objectif qu'il est important de quantifier cet effet, et donc de déterminer précisément les abondances des molécules soumises à cette pression de radiation, leurs opacités, et la pression de radiation elle-même. Le transfert radiatif est donc un élément clé pour déterminer ces paramètres et constitue dès lors un enjeu certain dans la compréhension de ce phénomène si important qu'est la perte de masse.

## **I.2 Les molécules dans les étoiles évoluées**

### **I.2.1 Les molécules dans la photosphère**

Comme nous l'avons explicité précédemment les molécules dans les étoiles évoluées et donc dans les RSG sont un ingrédient primordial de la chimie du milieu interstellaire. Mais bien plus que cela, elles jouent un rôle majeur dans la physique même de ces étoiles (voir Jorgensen, 1994). Elles sont des observables de choix pour contraindre les modèles, qu'il s'agisse de modèles d'atmosphère ou d'évolution car elle sont des traceurs de la nucléosynthèse. Mais elle sont aussi un ingrédient de la physique des étoiles capable de modifier leur structure thermodynamique, mais aussi des observables comme le spectre, ou le rayon interférométrique.

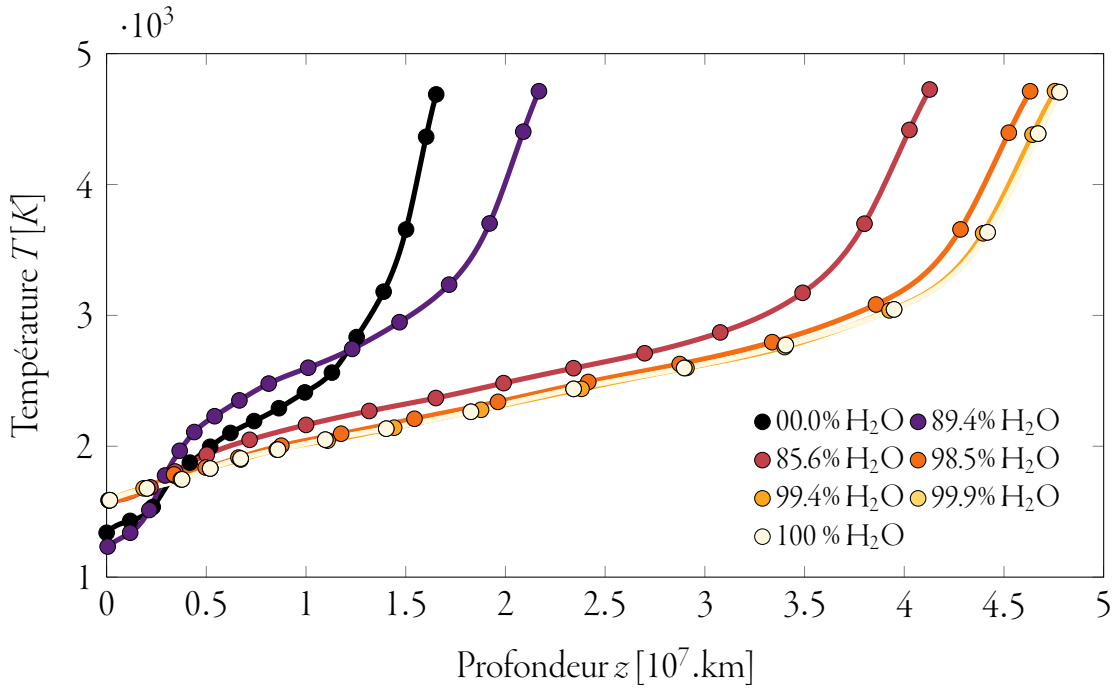
L'importance des molécules dans la photosphère est liée à l'empreinte qu'elles laissent sur le spectre. Ainsi, l'abondance absolue d'une molécule n'est pas forcément la caractéristique primordiale, celle qui en fera une observable de choix. Cet effet sur le spectre est lié à l'opacité de ces dernières et à leur moment dipolaire (ainsi  $H_2$  qui est de loin la molécule la plus abondante dans la photosphère n'a pas de spectre rotationnel car symétrique : elle n'a pas de moment dipolaire). L'effet sur le spectre est d'autant plus important que les bandes d'absorption moléculaire se situent proche du maximum d'émission de l'étoile qui, pour les RSG, est dans le proche infrarouge. Ajoutons

que la chimie, que ce soit dans la photosphère ou dans l'enveloppe, est déterminée par les abondances respectives des atomes présents. Ainsi la majorité des molécules sont composées des éléments H, C, N, O (issus entre autres de la nucléosynthèse). La détermination des abondances de ces molécules est donc un élément de contrainte fort pour les modèles d'évolution, qui doivent être en mesure de reproduire ces abondances, ainsi que les rapports isotopiques déterminés via des isotopomères. A ce jour, les processus de mélange capables de reproduire les abondances observées sont mal connus, contrairement à ceux des géantes.

À cause des températures de la photosphère, on trouve essentiellement des molécules diatomiques mais aussi d'autres molécules plus complexes avec un effet important. Les principales sont le TiO, essentiel pour la classification spectrale, le CO dont les bandes vibrationnelles sont très importantes au maximum d'émission des RSG, et H<sub>2</sub>O qui est présent en quantité importante. Cette dernière présente un spectre dense dans l'infrarouge, et est de plus un agent refroidissant essentiel dans la photosphère.

Afin de bien prendre conscience de la sensibilité de la structure thermodynamique d'une atmosphère d'étoile évoluée à la présence des molécules, notons que sur la base de modèles MARCS, on montre qu'un modèle d'atmosphère d'étoile carbonée ne considérant que les diatomiques voit cette atmosphère 25% moins étendue et avec une couche de surface 30 fois plus dense qu'un modèle incluant les opacités de (HCN, C<sub>2</sub>H<sub>2</sub>, C<sub>3</sub>) (voir Jorgensen, 1994). Pour ce qui est de H<sub>2</sub>O, on voit sur la figure I.6 à quel point l'effet est considérable sur la structure de l'atmosphère des étoiles oxygénées.

On peut donc dire que comprendre l'effet des molécules dans la photosphère, ou déterminer finement les abondances, opacités, pression de radiation ou refroidissement de ces molécules, ne consiste pas à raffiner les modèles d'étoiles froides, mais bel et bien à les comprendre. Cette compréhension des molécules n'est pas suffisante, elle est nécessaire. Ajoutons l'importance des effets hors ETL mis en évidence par Johnson (1994).



**FIGURE I.6** – *Extension de l’atmosphère d’un modèle MARCS d’étoile oxygénée ( $T_{\text{eff}} = 2800 \text{ K}$ ,  $\log g = -0.5$ ,  $C/O=0.43$ ) en considérant différentes complétudes des listes d’opacité de  $\text{H}_2\text{O}$ . (adapté de Jorgensen (1994)). On note l’importante variation de l’épaisseur géométrique de l’atmosphère (dernière couche) et de la structure en température liée à la prise en compte de cette molécule.*

## I.2.2 Les molécules dans l’enveloppe circumstellaire

Dans l’enveloppe circumstellaire, la richesse des molécules est très importante, que ce soit pour les étoiles carbonées ayant une chimie extrêmement riche du fait des possibilités d’association chimiques qu’offre l’atome de carbone (voir Patel et al., 2011), mais aussi autour des oxygénées comme l’ont récemment observé Ziurys et al. (2007) et Tenenbaum et al. (2010) par exemple. L’étude des molécules dans l’enveloppe est donc le premier pas permettant de comprendre la complexité et la diversité de la chimie du milieu interstellaire. Contrairement au milieu interstellaire, les enveloppes ont au premier ordre un champ de vitesse monotone qui permet d’étudier la chimie au cours du temps et en fonction de la température. De ce fait, leur étude est plus simple que la

chimie du milieu interstellaire dans lequel on observe des molécules issues de processus de tous âges (voir Guélin et al., 1996).

Leur étude est aussi un moyen d'accès au gradient thermique dans les enveloppes ainsi qu'au champ de vitesse. D'autre part, observées dans le millimétrique, elles sont un traceur important des rapports isotopiques du fait de la séparation des raies des isotopomères (voir Kahane et al., 2000).

Mais la chimie de l'enveloppe reste un enjeu complexe. La présence de molécules carbonées autour des oxygénées suggère que cette dernière est hors-équilibre (voir Cherchneff, 2006). De plus, contrairement à la chimie de l'enveloppe externe, les réactions en jeu ne sont pas uniquement des réactions ion-molécule, et sont donc conditionnées par des taux de réaction dépendant de la température car ayant une barrière d'activation. La compréhension de la chimie des enveloppes est donc conditionnée par la connaissance de ces taux de réaction et la complétude des réseaux. Enfin, certaines réactions sont dépendantes des photons UV provenant du milieu interstellaire, mais aussi de ceux produit dans la chromosphère. La bonne compréhension de ces réactions est un outil très intéressant pour la caractérisation du champ UV chromosphérique, mal contraint à ce jour (voir Carpenter et al., 1994).

Ajoutons par ailleurs que cette chimie complexe des enveloppes nécessite une étude fine de la structuration à petite échelle de celles-ci. Les « *clumps* » de l'enveloppe protègent les molécule du champ UV, et du fait de la plus grande densité de réactants, la cinétique chimique y est plus rapide et donc la chimie plus complexe (voir Smith et al., 2001).

Nous n'avons pas listé ici de manière exhaustive les effets et observables liés au molécules et à leur interaction avec le milieu, qu'il s'agisse de la photosphère ou de l'enveloppe. Mais l'on voit déjà que les molécules sont au carrefour de processus multiples

qui nécessitent d'être étudiés proprement et finement pour dresser un tableau complet et exhaustif de la structure, de l'évolution, de la chimie et de la dynamique des étoiles évoluées. L'un de ces processus est le transfert radiatif, qui permet d'évaluer les abondances, mais aussi de comprendre la physique sous-jacente à l'oeuvre dans ces étoiles au travers de toutes les interactions rayonnement-matière (refroidissement, pression de radiations, MASER, spectre, ...).

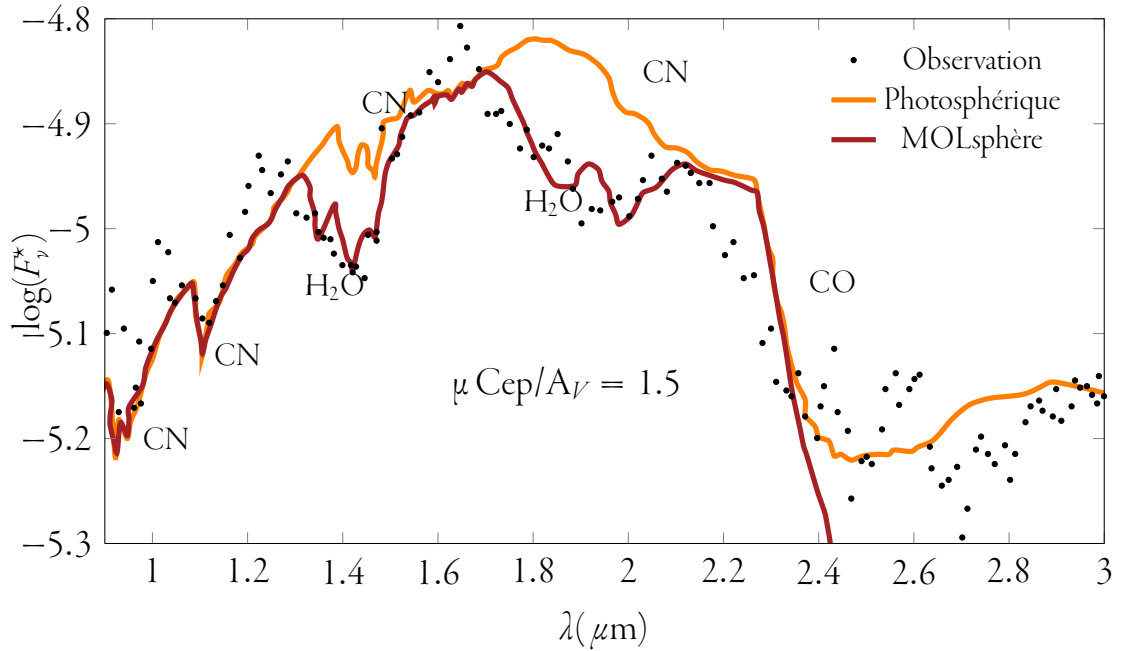
## I.3 Cas de H<sub>2</sub>O

L'eau est un élément clé dans les supergéantes rouges ne serait-ce que par sa quantité, et son influence sur le spectre infrarouge. En effet, pour des supergéantes rouges telles que  $\mu$  Cep ou  $\alpha$  Ori, l'eau constitue la principale source d'absorption entre 1.4 et 1.9  $\mu$ m (plus que CN, en contradiction avec les prédictions des modèles à l'ETL).

### I.3.1 Les MOLsphères

**Spectroscopie basse résolution** Dès le début des années 2000, des problèmes sur l'interprétation des raies de l'eau observées ont émergé. Le premier spectre à basse résolution du satellite ISO montrait de grandes différences entre la profondeur des bandes de l'eau autour du micron par rapport à ce que prédisaient les spectres synthétiques issus de modèles à l'ETL et purement photosphériques (voir figure I.7).

Dans le but de comprendre cet excès d'absorption de l'eau, la première étape consistait à relaxer l'hypothèse d'un spectre purement photosphérique et d'y ajouter un modèle simplifié d'enveloppe capable de reproduire les observations. Ainsi Tsuji (2000) a réussi, par l'ajout *ad hoc* d'une coquille d'eau sphérique, à reproduire les données observées. Cette coquille d'eau que l'on appelle MOLsphère aurait une température de 1500 +/- 500 K et une densité de colonne de l'ordre de  $10^{20}$  cm<sup>-2</sup>. Cela impliquerait que la MOLsphère se trouverait à quelques rayons stellaires de la photosphère.

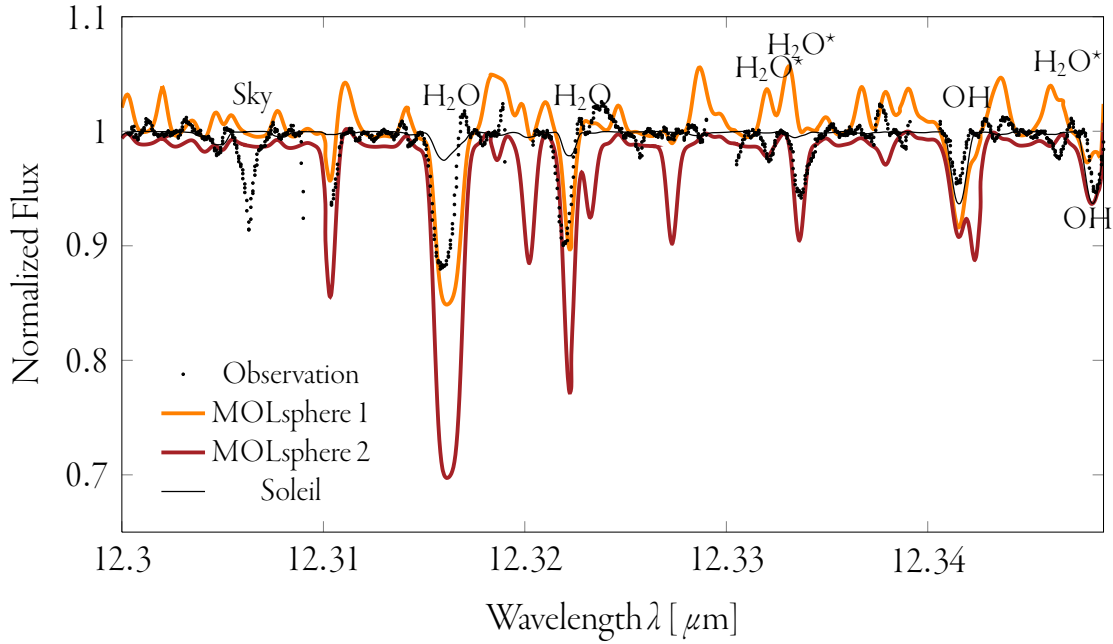


**FIGURE I.7** – Comparaison entre les spectres observés par ISO de  $\mu$  Cep et des spectres synthétiques issus d'un modèle purement photosphérique ( $T_{\text{eff}} = 3600$  K,  $M_{\star} = 15M_{\odot}$ ,  $R_{\star} = 650R_{\odot}$ ,  $L_{\star} = 6.10^4 L_{\odot}$ ) et d'un modèle avec MOLsphère ( $T_{\text{ex}} = 1500$  K,  $N_{\text{col}} = 3.10^{20} \text{ cm}^{-2}$ ). Figure adaptée de Tsuji (2000)

Cependant, cette hypothèse initialement introduite de manière ad-hoc, comme un « *toy model* » de l'enveloppe est devenue plus cohérente avec les observations interférométriques. En effet, on observe dans les courbes de visibilité une extension spatiale dans les bandes de l'eau plus importante que le rayon photosphérique déterminé à partir du continu (par exemple Ohnaka, 2004 et Perrin et al., 2005).

**Spectroscopie haute résolution** Les modèles de MOLsphère présentent cependant plusieurs difficultés d'interprétation. En effet, à 12  $\mu\text{m}$ , les différents modèles de MOLsphère prédisent des raies en émission. Or ces raies sont observées en absorption (voir Ryde et al., 2006) et donc probablement d'origine photosphérique (voir figure I.8). D'autre part, nous n'avons pour le moment aucun mécanisme de formation permettant d'expliquer les MOLsphères.





**FIGURE I.8** – Comparaison entre le spectre observé de  $\alpha$  Ori avec TEXES ( $\cdot$ ), et deux modèles de MOLsphères avec les paramètres suggérés par Tsuji (2000), soit une température  $T_{\text{ex}} = 1500\text{K}$  et une densité de colonne  $N_{\text{col}} = 3 \cdot 10^{20} \text{ cm}^{-2}$  composée uniquement d'eau. Le spectre (—) correspond à une MOLsphère ayant un rayon interne de  $1.4R_{\star}$  alors que (—) correspond à une MOLsphère de rayon  $1.6R_{\star}$ . On remarque que le modèle (—) prédit des raies en émission observées en absorption, alors que (—) ne reproduit pas la profondeur des raies observées. Figure adaptée de Ryde et al. (2006)

**Interférométrie** Enfin la confirmation interférométrique des MOLsphère est sujette à caution du fait du risque important de sur-interprétation des observations. Les interféromètres actuels étant pourvus d'un faible nombre de lignes de base, la couverture du plan  $uv$  (plan de Fourier) est faible, et le sous-échantillonnage de ce dernier nécessite une interprétation via des modèles. C'est justement cette forte dépendance aux modèles qu'il convient d'analyser.

Après avoir observé et déterminé la visibilité dans une bande, on construit à partir d'un modèle 1D statique la transformée de Fourier de ce modèle physiquement et géométriquement simplifié pour ajuster les observations. En ce qui concerne les RSG,

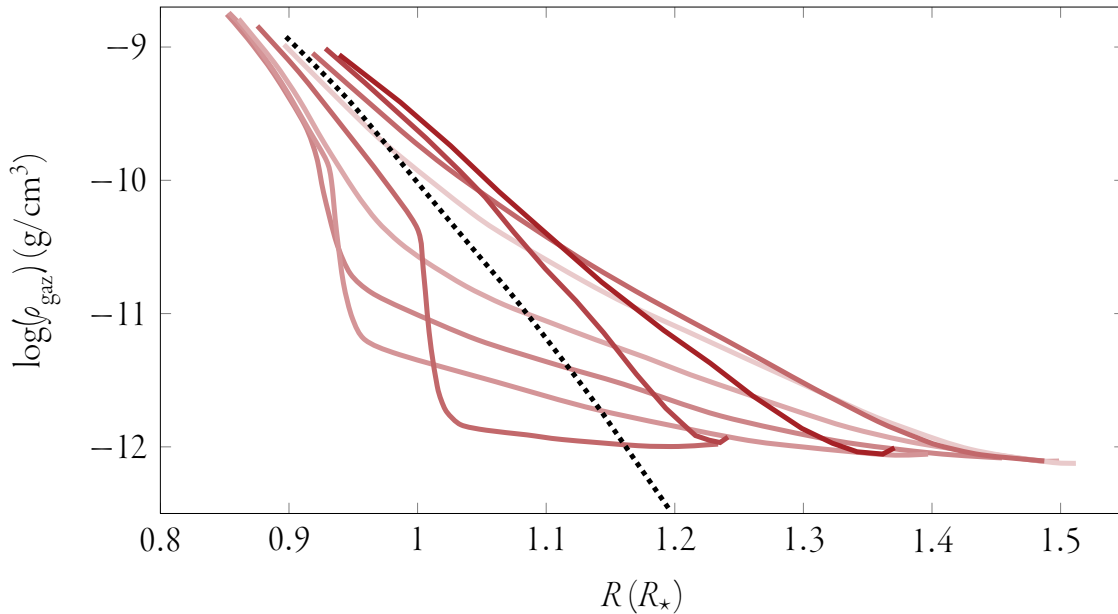
il est nécessaire de s'interroger sur la validité de cette modélisation.

En premier lieu, rappelons que l'atmosphère d'une RSG est extrêmement diluée (bien plus que le soleil) et qu'une RSG ne ressemble pas à un disque entouré d'une couronne assombrie sur le bord. La notion même de rayon ou de photosphère n'est pas aussi bien définie.

Faisons un parallèle avec les modèles dynamiques d'AGB. Les résultats de Nowotny et al. (2010) montre que la dynamique de l'atmosphère impulse selon les phases un rayon de l'atmosphère très différent (plus de 10%) d'un modèle statique (voir figure I.9).

Enfin, définir observationnellement la photosphère implique de définir la zone où pique la fonction de contribution du continu, zone qui peut se révéler 20% moins loin pour la fonction de contribution calculée à l'ETL du  $\text{TiO}$ . Qu'en est-t-il de la fonction de contribution de  $\text{H}_2\text{O}$ , de  $\text{CO}$  ou de  $\text{TiO}$  dans le cas d'un calcul hors ETL ? Qu'en est-t-il de l'influence du refroidissement, de la pression de radiation liées aux molécules sur la compacité de l'atmosphère dans le cas hors ETL ?

On voit avec cette liste non-exhaustive que l'on a une incertitude sur les rayons et les zones de formation des raies de l'ordre de la dizaine de pourcent du rayon stellaire. Peut-on dès lors affirmer qu'un pic de la fonction de contribution des raies de l'eau à  $1.3R_\star$  (soit environ 30%) implique nécessairement l'existence d'une coquille d'eau détachée sans mécanisme connu de formation connu et prédisant des raies d'émission vues en absorption ? Nous n'avons probablement pas tous les éléments en main pour trancher mais il serait sage de rester prudent.



**FIGURE I.9** – Diagramme rayon densité dans un modèle dynamique d'AGB adapté de Nowotny et al. (2010). L'opacité des courbes est fonction de la phase  $\phi \in [0, 1]$ . la courbe continue est issu d'un modèle statique d'atmosphère.

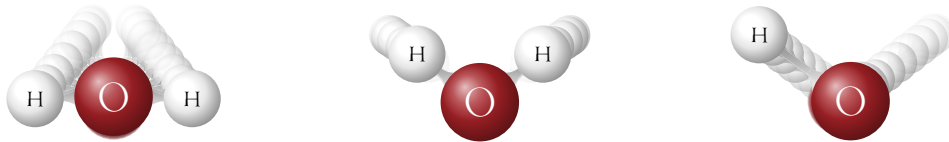
### I.3.2 Donnée moléculaires

Afin de bien comprendre l'importance des molécules et leurs impact sur différents phénomènes (perte de masse, pression de radiation, refroidissement etc...), il est nécessaire d'obtenir les données moléculaires permettant de quantifier le plus précisément ces mécanismes. On peut citer les réseaux de réactions chimiques pour correctement modéliser les abondances, et les données propres telles que les niveaux d'énergie et les probabilités de transition entre chacun de ces niveaux.

**La molécule d'eau** La molécule d'eau est une molécule triatomique possédant un grand nombre de degrés de liberté (trois axes de rotation et trois modes de vibration) ce qui lui confère un spectre complexe. Elle a une énergie de dissociation équivalente à un nombre d'onde de  $41\,128 \pm 24 \text{ cm}^{-1}$  (voir Ruscic et al., 2002). Sous cette énergie de dissociation, la molécule peut tourner et vibrer selon plusieurs modes de vibration,

et de rotation :

la molécule d'eau est soumise à trois modes de vibrations, le mode  $\nu_1$  de pliage, un mode d'élongation symétrique  $\nu_2$  et un troisième mode antisymétrique  $\nu_3$ . D'autre part, ces modes se structurent en états rotationnels selon trois axes de rotation. L'asymétrie de la



**FIGURE I.10** – *Les trois modes de vibration de la molécules d'eau. De gauche à droite, on voit les modes dont l'énergie est donné pour le premier mode excité du mode de pliage  $\nu_1 = 3657 \text{ cm}^{-1}$ , d'élongation symétrique  $\nu_2 = 1595 \text{ cm}^{-1}$  et d'élongation antisymétrique  $\nu_3 = 3756 \text{ cm}^{-1}$  (voir Naumenko & Campargue, 2003)*

molécule d'eau implique que les modes de rotation (toupie asymétrique) sont représentés par le nombre quantique  $J$  associé au moment angulaire et ses projections  $K_a$  et  $K_c$  sur les axes d'inertie. De plus, du fait de la direction de son moment dipolaire,  $K_a$  et  $K_c$  doivent changer tous les deux en respectant les règles de sélection ( $\Delta J = 0, \pm 1$ ,  $\Delta K_a = 0, 2, 4, \dots$ ,  $\Delta K_c = 0, 2, 4, \dots$ ). (voir Tennyson et al., 2001).

Ajoutons que la molécule d'eau se présente sous deux formes (isomères de spin) ortho et para selon que les spins des noyaux d'hydrogène sont orientés parallèlement ( $\uparrow\uparrow$ ) ou anti-parallèlement ( $\uparrow\downarrow$ ).

**Transitions radiatives et niveaux d'énergie** Comme nous le verrons par la suite, un des ingrédients essentiels à un calcul précis de transfert radiatif hors-équilibre thermodynamique local est la connaissance de l'énergie des niveaux d'excitation de la molécule.

Pour ce qui est de l'eau, la détermination des niveaux d'énergie est assez sensible aux approximations sur l'Hamiltonien (approximation de Born–Oppenheimer, surface de potentiel). Afin de limiter les écarts, Shirin et al. (2003) ont construit une surface de potentiel à partir d'un calcul ab-initio de grande précision, corrigé et ajusté sur des données expérimentales issues de la spectroscopie. Néanmoins, nous adopterons les listes de niveaux calculés par Tennyson et al. (2001), qui avec une correction plus simple sur les données spectroscopiques, obtiennent une précision semblable.

En ce qui concerne les transitions radiatives, et les coefficients d'Einstein  $A_{ij}$ , les données les plus fiables, aux températures qui nous intéressent, ne sont pas expérimentales, mais issues d'un calcul quantique. Pour cela on détermine la fonction d'onde sur chacun des niveaux d'énergie. Ainsi Barber et al. (2006) ont déterminé à partir d'une surface de moment dipolaire la force de raie de chaque transition :

$$S_{ij} = (2J' + 1)(2J'' + 1) \left| \langle \psi' | \bar{\mu} | \psi'' \rangle \right|^2 \quad (\text{I.1})$$

où  $J'$  et  $J''$  sont les nombres quantiques de rotation sur les états  $i$  et  $j$ ,  $\psi'$  et  $\psi''$  les fonctions d'onde, et  $\bar{\mu}$  le vecteur moment dipolaire électronique.

Ainsi ils déterminent les coefficients d'Einstein

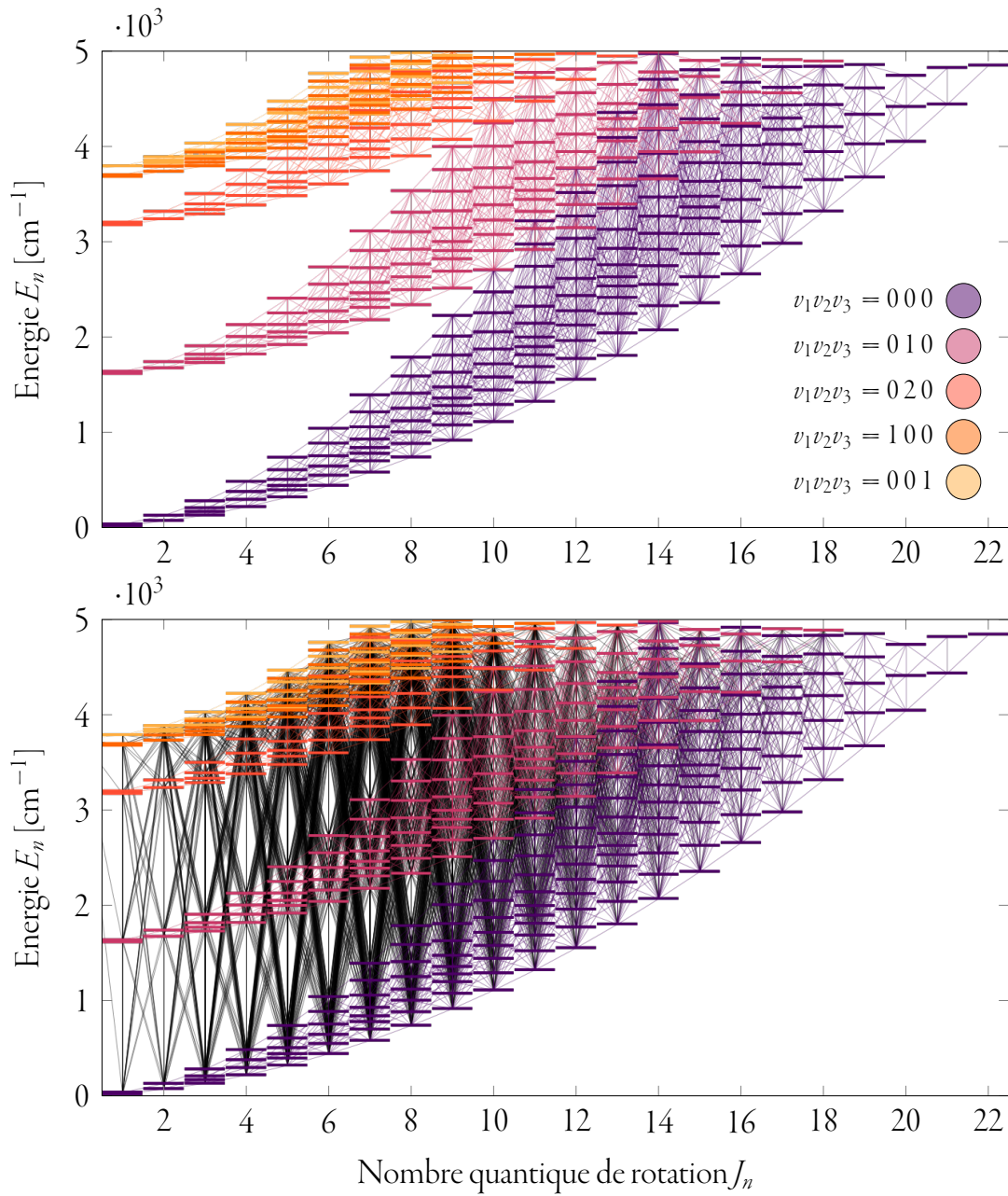
$$A_{ij} = \frac{16\pi^3}{3\varepsilon_0 c^3 h} \nu^3 \frac{S_{ij}}{2J' + 1} \quad (\text{I.2})$$

À partir de ces taux de désexcitation spontanée, on construit les coefficients d'Einstein liés aux (dés-)excitations induites  $B_{ij}$  grâce à la relation

$$\frac{g_i}{g_j} A_{ij} = \frac{2h\nu^3}{c^2} B_{ji} \quad (\text{I.3})$$

On note que ces taux radiatifs sont indépendants de la température.

Comme on le voit sur la figure I.11, tous les états ne sont pas reliés à tous les autres. Ceci est lié aux règles de sélection qui interdisent les transitions radiatives telles que  $\Delta J > 1$ .



**FIGURE I.11** – Diagramme de Grotrian de  $\text{H}_2\text{O}$  Ortho. Nous considérerons par la suite 411 niveaux de l'eau pour chaque isomère de spin. Les transitions colorées sont purement rotationnelles (figure du haut), les noires sont des transitions ro-vibrationnelles (figure du bas).

**Taux de collisions** De même qu'il est nécessaire de connaître les probabilités de transition radiative, le transfert hors ETL nécessite de connaître la probabilité de transition liée à un choc inélastique avec une particule du milieu ( $e^-$ ,  $H_2$  pour les plus importantes).

Contrairement aux taux radiatifs, ces taux dépendent de la température et ne sont pas soumis aux règles de sélection, ce qui signifie que chaque niveau est relié à tous les autres, ce qui du point de vue de la Mathématique est ce que l'on appelle un graphe irréductible. Nous y reviendrons par la suite. En revanche, certaines de ces transitions sont très peu probables ; on parle de règles de propension. D'autre part, il est bien plus difficile, voire impossible, d'utiliser un calcul quantique pour déterminer la valeur de ces taux dans les conditions de températures qui nous intéressent (celles de l'atmosphère des RSG).

Pour déterminer ces taux, il faut construire la surface de potentiel du système [ $H_2O$  + collisionneur]. La dimension de cette surface est fonction de la symétrie du système. Pour  $H_2O-H_2$  on a une surface de potentiel à 9 dimensions. On peut à l'aide de certaines approximations (rotateur rigide, extrapolation angulaire classique, ...) simplifier la taille du problème et effectuer un calcul quantique ou quasi-classique pour les premiers niveaux (voir Faure et al., 2007), mais pas pour les 822 niveaux (411 pour  $H_2O$ -ortho et 411 pour  $H_2O$ -para) soit 15194 transitions radiatives et 337020 transitions collisionnelles.

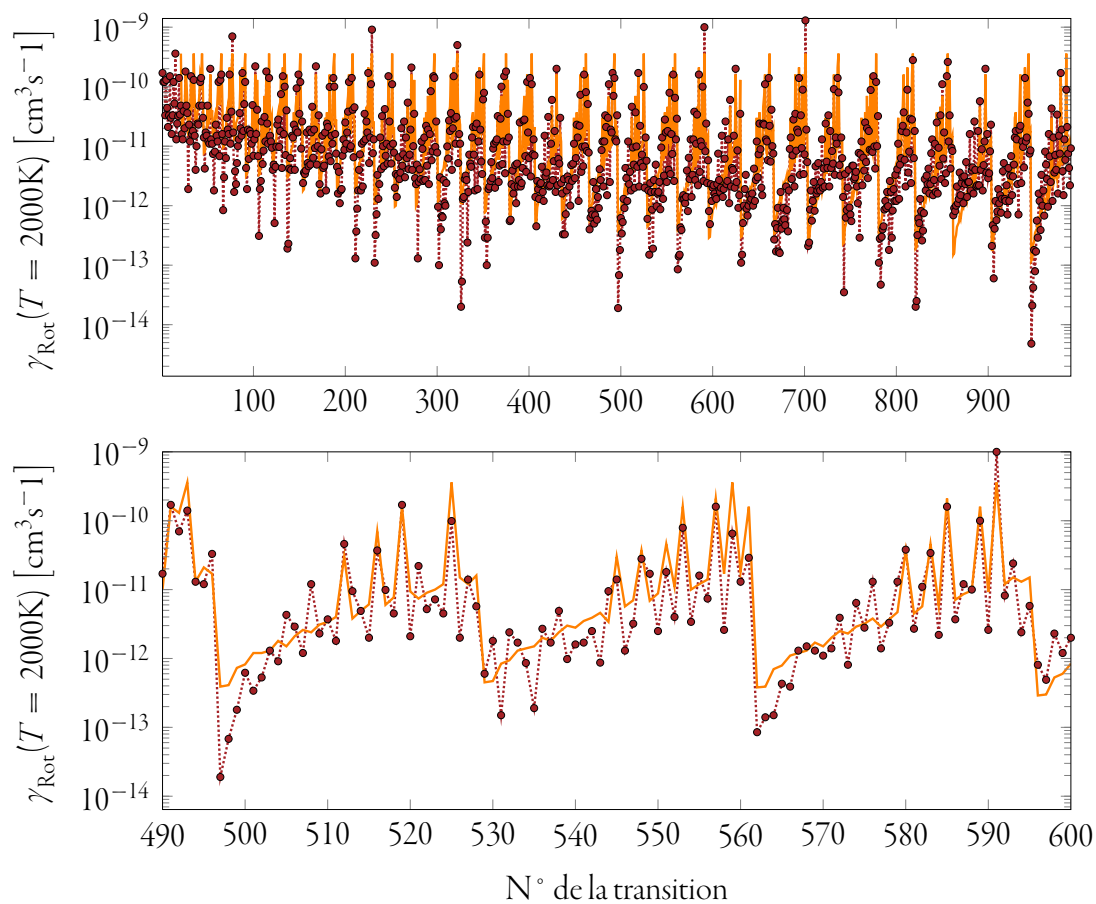
Les taux utilisés seront ceux déterminés par Faure & Josselin (2008) qui sont des taux extrapolés à grand  $J$  sur la base d'un calcul quantique et quasi-classique des niveaux les plus bas. Cette approximation basée sur la théorie de l'information développée par Levine (1978) et qui permet de corréler un grand nombre de données théoriques et expérimentales sur les collisions moléculaires, et d'en déduire une tendance dans la relation entre ces taux de collision, et la température, par exemple. Cette technique ne

se contente pas d'extrapoler les taux avec un terme dépendant de la température, mais reproduit les règles de propension, indispensables à la modélisation de la dynamique de niveau dans la molécule d'eau. D'autre part, ces taux sont validés (précision d'un facteur  $\sim 2 - 3$ ) par les résultats d'un calcul purement quantique sur les premiers niveaux de l'eau de Dubernet et al. (2009).

A l'aide de ces données moléculaires, il nous est possible d'étudier l'influence des molécules dans la photosphère et en particulier le transfert radiatif hors ETL. Comme nous le verrons au chapitre II, le transfert radiatif hors ETL peut être très coûteux en temps de calcul, et l'exploitation d'un si grand nombre de niveaux/transitions constitue un challenge qui impliquera le développement d'une méthode et d'un outil capable de gérer autant de niveaux.

L'ambition de ce traitement fin du transfert radiatif prenant en compte tous ces niveaux permettra de quantifier la réelle influence de l'eau dans les étoiles en comparaison avec un traitement ETL.





**FIGURE I.12** – Taux de Collision  $\text{H}_2\text{Ortho}-\text{H}_2$  calculés à partir d'un modèle quasi classique (.....), comparé à la méthode d'extrapolation (—). On remarque que la méthode d'extrapolation reproduit les règle de propension, et la valeur des taux les plus importants. (Figure adaptée de Faure & Josselin (2008)).

## TRANSFERT RADIATIF

*« La lumière est la plus belle créature de ce monde ;  
elle vient du ciel et nous en donne le pressentiment. »*

**JEAN BOUSQUET**

Extrait de « Le Diable apparaît à Saint-Tristan »

CHAPITRE II : TRANSFERT RADIATIF . . . . .	41
<b>II.1 Equation de transfert . . . . .</b>	<b>44</b>
II.1.1 Intensité spécifique . . . . .	44
II.1.2 Coefficients monochromatiques . . . . .	46
II.1.3 Équation de Transfert . . . . .	52
II.1.4 Solution formelle . . . . .	55
<b>II.2 Aspects hors ETL . . . . .</b>	<b>58</b>
II.2.1 Équilibre statistique . . . . .	59
II.2.2 Conditions physiques et densité critique . . . . .	61
II.2.3 Non-localité et non-linéarité . . . . .	62
<b>II.3 Méthodes de résolution classique . . . . .</b>	<b>63</b>
II.3.1 Probabilité d'échappement . . . . .	63
II.3.2 ALI : Jacobi, Gauss-Seidel, SOR . . . . .	67



L'astrophysique a ceci de singulier que les objets qu'elle étudie (hors Système Solaire) ne sont pas directement accessibles en laboratoire. De ce fait, leur compréhension ne peut se faire que via l'observation et donc à travers l'étude du seul vecteur d'information qui nous parvient de ces derniers, leur lumière. On pourrait aussi citer les neutrinos ou les ondes gravitationnelles, mais cela reste encore anecdotique.

Cette lumière, pour qui sait en extraire l'information, donne accès aux empreintes des processus physiques qui l'ont générée ou modifiée et donc l'historique de son voyage à travers la matière. D'autre part, la modélisation des objets astrophysiques et des processus physiques ainsi que leur confrontation à l'observation est un moyen efficace d'avoir accès à la physique de ces astres.

Mais ceci présuppose la capacité de pouvoir reproduire les marques que le milieu imprime à la lumière et de savoir calculer une observation synthétique qui via une démarche inverse de confrontation à l'observation permettra de déduire la structure du milieu.

C'est donc cette étude théorique du transfert de rayonnement à travers un milieu matériel qui sera l'objet de ce chapitre, et qui sera la clé de voûte de l'interprétation de l'eau dans les RSG, car dans ces objets très lumineux, le rayonnement et la matière s'influencent de manière forte.

Il ne s'agira pas ici de développer une vue exhaustive du transfert radiatif qui est un thème de recherche à part entière, mais d'en expliciter les fondamentaux. Le lecteur pourra approfondir les notions développées ci-après avec des livres de référence sur le sujet tel que Mihalas (1978) et Peraiah (2001).

## II.1 Equation de transfert

Afin de comprendre la propagation de la lumière dans un milieu donné, nous définirons ci-dessous quelques grandeurs importantes telles que l'intensité spécifique, ainsi que les coefficients d'absorption et d'émission du milieu qui nous permettront de poser l'équation de transfert sous sa forme canonique.

### II.1.1 Intensité spécifique

Un rayon lumineux monochromatique transporte par unité de temps, d'aire et d'angle solide, dans un intervalle de fréquence  $d\nu$  une énergie  $E_\nu$  tel que :

$$dE_\nu = I_\nu(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t) (\mathbf{k} \cdot \mathbf{n}) dA dt d\nu d\omega \quad (\text{II.1})$$

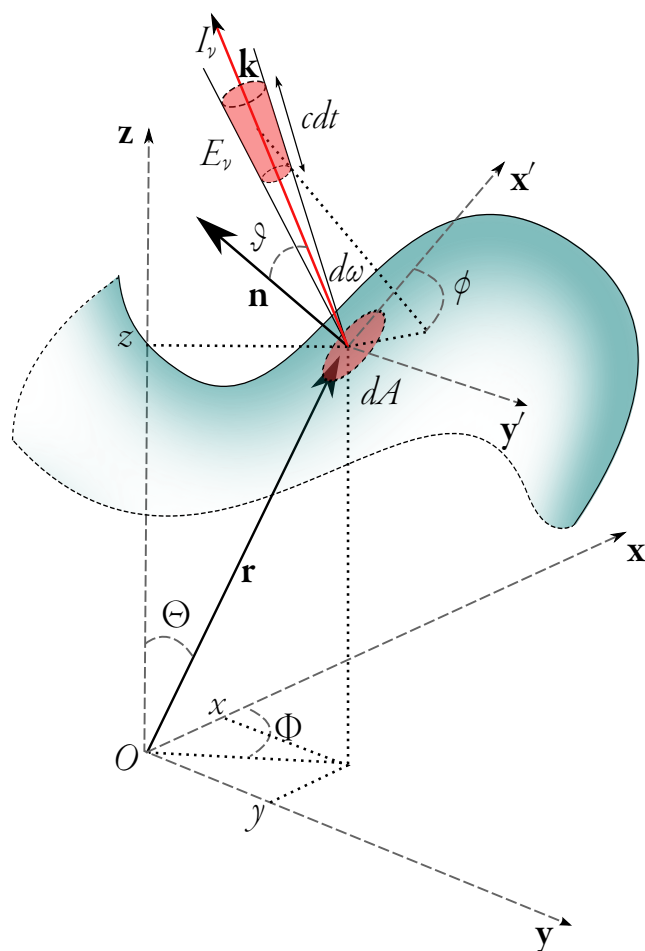
$$= I_\nu(x, y, z, \vartheta, \phi, t) \cos(\vartheta) dA dt d\nu d\omega \quad (\text{II.2})$$

On appelle intensité spécifique, le coefficient de proportionnalité  $I_\nu$  de l'équation (II.1). C'est l'intensité spécifique qui est la solution de l'équation de transfert que nous développerons plus bas. Cette grandeur est liée au flux monochromatique par la relation :

$$\mathcal{F}_\nu = \oint I_\nu \cos(\vartheta) d\omega \quad (\text{II.3})$$

L'équation de transfert permettra de mettre en relation l'intensité spécifique et l'ensemble des processus physiques qui modifieront sa valeur.

Ces processus sont de trois natures différentes : les processus d'absorption, de diffusion et d'émission.



**FIGURE II.1** – Définition des variables utilisées dans ce chapitre. On y voit en particulier la définition de l'intensité spécifique et ce, dans le cadre d'une géométrie quelconque.

## II.1.2 Coefficients monochromatiques

Comme explicité plus haut, la valeur de l'intensité spécifique va être modifiée lors de la traversée de la matière. Cette valeur peut être diminuée lors de la traversée d'un élément de matière d'épaisseur  $ds$ , on parlera alors d'extinction du milieu. Si au contraire la valeur de l'intensité augmente, on parlera d'émission.

Ces deux phénomènes, extinction et émission recouvrent un grand nombre de processus physiques différents.

### Extinction

L'extinction regroupe deux types de processus, l'absorption et la diffusion (« *scattering* » en anglais). En effet, en traversant la matière, un pinceau de lumière peut subir un processus inélastique et perdre de l'énergie au profit de l'énergie cinétique du gaz (thermalisation), mais il peut aussi subir une diffusion qui, même si elle est élastique (cohérente) redistribue angulairement l'énergie incidente ce qui correspond donc à une perte pour le pinceau lumineux.

$$\partial E_\nu = -\chi_\nu(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t) I_\nu(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t) dA ds dt d\nu d\omega \quad (\text{II.4})$$

$$\partial I_\nu = -\chi_\nu(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t) I_\nu(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t) ds \quad (\text{II.5})$$

Le coefficient  $\chi_\nu$  est appelé coefficient d'extinction monochromatique, et il est la somme des processus d'absorption (continue ou discrète) et de diffusion.

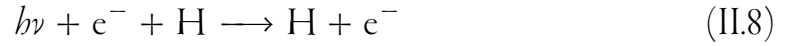
$$\chi_\nu(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t) = \chi_\nu^{\text{Abs}}(\mathbf{r}, t) + \chi_\nu^{\text{Scat}}(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t) \quad (\text{II.6})$$

Ces processus ont une certaine section efficace  $\sigma_\nu$  tel que :

$$\chi_\nu^{\text{Tot}} = \sum_i \sigma_\nu^i n_i \quad (\text{II.7})$$

où  $n_i$  est la densité de l'espèce à l'origine du processus.

**Absorption libre-libre** Les absorptions libre-libre, « *free-free* » (ff) en anglais, résultent de l'absorption d'un photon par un électron non lié à un atome. En ce qui concerne les processus libre-libre qui vont être dominants dans les RSG et dans l'infrarouge on peut citer  $H_{\text{ff}}^-$ ,  $H_{\text{ff}}$  et  $H_{2\text{ff}}$ . Par exemple, pour  $H^-$ ,



D'un point de vue général, on peut comparer ce type de processus à du Bremsstrahlung inverse.

Afin de déterminer le coefficient monochromatique de ce processus, on utilise la section efficace de ce dernier que l'on dérive de la formule de Kramers pour les hydrogénoides (voir Rybicki & Lightman, 1979). On montre alors que ce coefficient s'écrit :

$$\chi_{\nu}^{\text{ff}} = C^{\text{e}} n_e \frac{Z^2}{\sqrt{T} \nu^3} g_{\text{ff}} \times n_{\text{ion}} \left( 1 - e^{-h\nu/kT} \right) \quad (\text{II.9})$$

Où les facteurs de Gaunt  $g_{\text{ff}}$  correspondent à une correction quantique au calcul classique.

Ces coefficients peuvent avoir un développement analytique très compliqué et donc inutilisable en l'état. On trouve dans la littérature des ajustements polynomiaux de ces coefficients d'absorption qui sont plus facilement exploitables (voir Table .4).

**Absorption lié-libre** Les absorptions lié-libre, « *bound-free* » (bf), correspondent à des mécanismes de photo-ionisation. L'énergie du photon incident libère un électron lié à un atome et impulse une certaine vitesse à ce dernier. Par exemple,



Le coefficient d'absorption monochromatique se dérive aussi de la formule de Kramers :

$$\chi_{\nu}^{\text{bf}} = C^{\text{e}} \frac{Z^4}{n^5 \nu^3} g_{\text{bf}} \times n_i \left( 1 - e^{-h\nu/kT} \right) \quad (\text{II.11})$$



**Scattering** Les processus d'absorption décrits plus haut, sont des processus inélastiques (l'énergie du photon est perdue par le faisceau lumineux). Pour ce qui est de la diffusion, les processus qui nous intéressent sont élastiques (cohérents).

En effet, en ce qui concerne les mécanismes de diffusion en œuvre dans les RSG, on peut citer la diffusion Thomson sur les électrons libres et la diffusion Rayleigh sur les atomes et molécules qui prédominent dans la photosphère, mais aussi la diffusion de Mie sur les poussières de l'enveloppe circumstellaire.

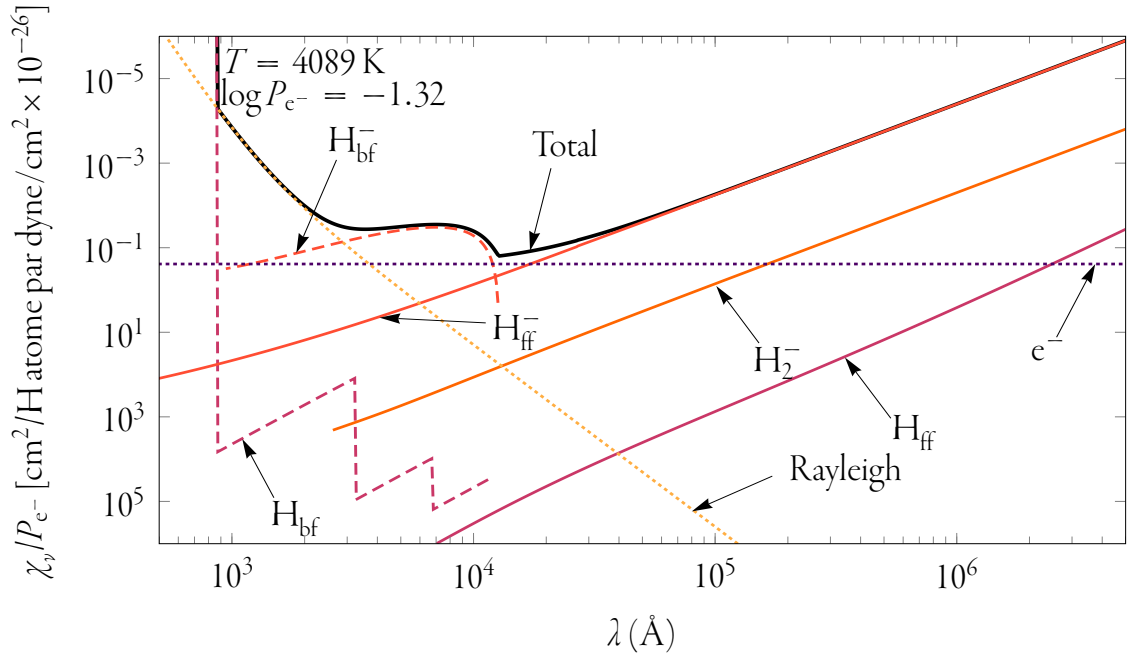
Si la diffusion peut être considérée comme un mécanisme d'extinction, c'est parce que même si l'énergie lumineuse est conservée elle peut être angulairement redistribuée et donc ne plus contribuer au faisceau incident (dans un certain élément d'angle solide) mais aller contribuer à un autre faisceau.

De ce fait la diffusion est à la fois un mécanisme d'extinction mais aussi un mécanisme d'émission. Nous y reviendrons donc plus bas pour comprendre la contribution positive qu'elle peut apporter à l'émissivité monochromatique.

**Absorption liée-liée** Nous venons de parler précédemment d'absorption continue, continue dans le sens où les photons de n'importe quelle fréquence peuvent être absorbés.

En ce qui concerne les absorptions liées-liées, il s'agit de processus discrets. Ils correspondent aux transitions électroniques dans les atomes ou rotationnelles, vibrationnelles, ou ro-vibrationnelles dans les molécules. L'absorption d'un photon change l'état d'énergie de l'espèce chimique concernée. Cette différence entre processus continu et discret est importante dans l'étude de spectre, car elle est le reflet de la composante continue du spectre (résultant des processus continus) et des raies spectrales qui elles, sont formées lors du changement d'état interne d'une espèce chimique.

Le coefficient monochromatique est égal à l'énergie d'un photon  $h\nu$  multiplié par le nombre de photons absorbés, c'est à dire le nombre d'atomes dans l'état bas  $n_l$  pondéré par la probabilité d'excitation vers le niveau haut  $B_{lu}\phi(\nu - \nu_0)$ , où  $B_{lu}$  est le coefficient



**FIGURE II.2** – *Processus d'absorptions continus dominants dans l'atmosphère de type RSG à  $\tau_{500} = 1$  d'un modèle MARCS de  $\alpha$  Ori. Ces absorptions continus ont été calculées avec les ajustement polynomiaux de la table .4*

d'Einstein et  $\phi(\nu - \nu_0)$  la densité de probabilité ou profil d'absorption à la fréquence  $\nu$  pour une transition dont la fréquence de résonance est  $\nu_0$ , plus un terme de correction similaire et lié à l'excitation induite, le tout normalisé par  $4\pi$  sr.

On a donc un coefficient :

$$\chi_\nu^{\text{bb}} = \frac{h\nu}{4\pi} [n_l B_{lu} \phi(\nu - \nu_0) - n_u B_{ul} \psi(\nu - \nu_0)] \quad (\text{II.12})$$

$$= \frac{h\nu}{4\pi} n_l B_{lu} \phi(\nu - \nu_0) \left[ 1 - \frac{n_u g_l \psi(\nu - \nu_0)}{n_l g_u \phi(\nu - \nu_0)} \right] \quad (\text{II.13})$$

La détermination de ce coefficient est un enjeu majeur dans l'interprétation des spectres et la résolution de l'équation de transfert. Comme nous le voyons dans l'équation (II.12), il dépend des populations sur les états d'excitation de l'espèce chimique considérée, dont la détermination peut s'avérer complexe dans des conditions hors équilibre thermodynamique local.

## Émission

Nous avons vu que le milieu pouvait contribuer négativement à l'intensité spécifique à cause des processus d'extinction. Mais inversement, le milieu peut être émissif et augmenter l'énergie lumineuse dans un faisceau monochromatique :

$$\delta E_\nu = \eta_\nu(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t) dA ds dt d\nu d\omega \quad (\text{II.14})$$

$$\delta I_\nu = \eta_\nu(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t) ds \quad (\text{II.15})$$

Où  $\eta_\nu$  est le coefficient d'émissivité monochromatique.

Ce coefficient peut là aussi être séparé en trois composantes : une composante thermique, que l'on peut considérer à l'ETL, la diffusion, et les transitions liées-liées.

**Émission thermique** À l'équilibre thermique les puissances rayonnée et absorbée par le milieu se compensent. Ainsi la somme des équations (II.4) et (II.14) doivent être égales à 0 :

$$\delta E^{\text{Emi}} + \delta E^{\text{Abs}} = [\eta_\nu^{\text{Therm}} - \chi_\nu(\mathbf{r}, t) I_\nu(\mathbf{r}, t)] dA ds dt d\nu d\omega = 0 \quad (\text{II.16})$$

$$\eta_\nu^{\text{Therm}} = \chi_\nu(\mathbf{r}, t) I_\nu(\mathbf{r}, t) \quad (\text{II.17})$$

Dans le cas où le système est à l'équilibre thermodynamique local (ETL), l'intensité émise est la fonction de Planck, directement reliée à la température cinétique du gaz :

$$\eta_\nu^{\text{Therm}} = \chi_\nu B_\nu(T) \quad (\text{II.18})$$

**Diffusion** D'un point de vue général la diffusion peut redistribuer l'énergie lumineuse fréquemment (si inélastique) et/ou angulairement. De ce fait, la diffusion nécessite de connaître la fonction de redistribution  $\mathcal{R}(\nu, \mathbf{k}; \nu', \mathbf{k}')$  qui est la densité de probabilité (normalisée) qu'un photon de fréquence  $\nu$  et de vecteur d'onde  $\mathbf{k}$  soit diffusé en un photon de fréquence  $\nu'$  et de vecteur d'onde  $\mathbf{k}'$ .

Ainsi le coefficient d'émissivité s'écrit :

$$\eta^{\text{Scat}}(\mathbf{r}, \mathbf{k}) = \sigma_0(\mathbf{r}) \oint \frac{d\omega'}{4\pi} \int_0^\infty \mathcal{R}(\nu, \mathbf{k}; \nu', \mathbf{k}') I_{\nu'}(\mathbf{r}, \mathbf{k}') d\nu' \quad (\text{II.19})$$

où  $\sigma_0(\mathbf{r})$  est le coefficient de diffusion total telle que  $\sigma_\nu(\mathbf{r}) = \sigma_0(\mathbf{r})\phi_\nu$ .

En ce qui concerne les diffusions Rayleigh et de Mie, elles sont par nature cohérentes. Pour la diffusion Thomson (qui n'est autre qu'un régime limite à basse énergie de la diffusion Compton), elle est elle aussi cohérente si les électrons ont une énergie  $E_{e^-} < 45 \text{ keV}$ . Or dans les atmosphères de RSG ( $T \simeq 3000 \text{ K}$ ), les électrons ont une énergie de l'ordre de  $E_{e^-} = k_b T \simeq 1 \text{ eV}$ . Ainsi, les photons absorbés et émis ont la même fréquence  $\nu = \nu'$  et  $\mathcal{R}$  s'annule pour toutes fréquences  $\nu' \neq \nu$ . On peut donc réécrire la fonction de redistribution :

$$\mathcal{R}(\nu, \mathbf{k}; \nu', \mathbf{k}') = \mathcal{P}(\mathbf{k}, \mathbf{k}')\phi(\nu')\delta(\nu - \nu') \quad (\text{II.20})$$

Où  $\phi$  est le profil d'absorption et  $\mathcal{P}$  est une fonction de phase (angulaire) normalisée à 1.

En ce qui concerne les diffusions Thomson, Rayleigh et de Mie, cette fonction de phase est :

$$\mathcal{P}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \frac{3}{4}(1 + \cos^2 \Phi) \quad (\text{II.21})$$

Où  $\Phi = (\mathbf{k} \cdot \mathbf{k}')$ .

Dans ce cas, l'équation (II.19) se réduit à :

$$\eta^{\text{Scat}}(\mathbf{r}, \mathbf{k}) = \sigma_\nu(\mathbf{r}) \oint \frac{d\omega'}{4\pi} \mathcal{P}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') I_\nu(\mathbf{r}, \mathbf{k}') \quad (\text{II.22})$$

Afin de simplifier le traitement de la diffusion, nous ferons par la suite l'hypothèse que les processus sont isotropes et qu'ainsi, les contributions angulaires qui contribuent à l'émissivité de la diffusion se moyennent. Autrement dit, nous considérerons qu'il n'est pas utile de traiter la diffusion comme dipolaire, mais comme un processus isotrope. Dans le cas contraire, on pourrait aussi introduire la polarisation.

Dans ce cas, la fonction de phase se réduit à  $\mathcal{P}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \equiv 1$ , et le coefficient d'émissivité :

$$\eta^{\text{Scat}}(\mathbf{r}) = \sigma_\nu(\mathbf{r}) \mathcal{J}_\nu(\mathbf{r}) \quad (\text{II.23})$$

où  $\mathcal{J}_\nu$  est le champ moyen, c'est à dire la moyenne angulaire de l'intensité spécifique :

$$\mathcal{J}_\nu = \oint \frac{d\omega'}{4\pi} I_\nu \quad (\text{II.24})$$

**Émission liée - liée** Les atomes et molécules peuvent également lors de transitions d'un état d'énergie vers un autre, émettre des photons.

$$\eta_\nu^{\text{bb}} = \frac{h\nu}{4\pi} n_u A_{ul} \varphi(\nu - \nu_0) \quad (\text{II.25})$$

### II.1.3 Équation de Transfert

Grâce à l'ensemble des processus physiques que nous avons développés plus haut et les coefficients monochromatiques qui en dérivent, nous pouvons dès lors poser l'équation de transfert.

#### Dérivation de l'équation

Pour déterminer la variation de l'intensité spécifique à travers la matière, on fait un bilan d'énergie d'un pinceau de lumière traversant un élément d'épaisseur  $ds$  de matière.

$$\Delta E = [I_\nu(\mathbf{r} + \Delta\mathbf{r}, \mathbf{k}, t + \Delta t) - I_\nu(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t)] dA dt d\nu d\omega \quad (\text{II.26})$$

$$= [\eta_\nu(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t) - \chi_\nu(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t) I_\nu(\mathbf{r}, t)] ds dA dt d\nu d\omega \quad (\text{II.27})$$

On peut déduire de l'équation (II.26) l'équation de transfert :

$$\frac{1}{c} \frac{\partial I_\nu}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{k} I_\nu) = \eta_\nu - \chi_\nu I_\nu \quad (\text{II.28})$$

Dans l'hypothèse où l'équation est indépendante du temps (régime stationnaire), l'équation (II.28) se réduit à :

$$\frac{\partial I_\nu(\mathbf{r}, \mathbf{k})}{\partial s} = \eta_\nu(\mathbf{r}, \mathbf{k}) - \chi_\nu(\mathbf{r}, \mathbf{k}) I_\nu(\mathbf{r}, \mathbf{k}) \quad (\text{II.29})$$

**Géométrie sphérique** En développant le Laplacien de l'équation (II.28) en coordonnées sphériques, et en posant  $\Theta$  et  $\Phi$  les angles d'Euler du rayon vecteur  $\mathbf{r}$ , et  $\vartheta$  et  $\phi$ , les angles polaire et azimutal entre  $\mathbf{r}$  et  $\mathbf{k}$  (cf. Figure II.1), l'équation de transfert se réécrit :

$$\mu \frac{\partial I_\nu}{\partial r} + \frac{\varepsilon}{r} \frac{\partial I_\nu}{\partial \Theta} + \frac{\xi}{r \sin \Theta} \frac{\partial I_\nu}{\partial \Phi} + \frac{1 - \mu^2}{r} \frac{\partial I_\nu}{\partial \mu} - \frac{\xi \cot \Theta}{r} \frac{\partial I_\nu}{\partial \phi} = \eta_\nu - \chi_\nu I_\nu \quad (\text{II.30})$$

Où  $\mu = \cos \vartheta$ ,  $\varepsilon = \sin \vartheta \cos \phi$  et  $\xi = \sin \vartheta \sin \phi$ . Pour réduire cette équation à un problème 1D, on considèrera que le problème ne dépend plus que de la norme du rayon vecteur et non pas de ses angles (ce qui annule les dérivées sur  $\Theta$  et  $\Phi$ ). Le système devient donc axi-symétrique et le vecteur  $\mathbf{k}$  ne dépend que de l'angle avec  $\mathbf{n}$  et non plus de l'azimut (ce qui annule la dérivée sur  $\phi$ ). L'équation (II.30) se réduit donc à :

$$\mu \frac{\partial I_\nu}{\partial r} + \frac{1 - \mu^2}{r} \frac{\partial I_\nu}{\partial \mu} = \eta_\nu - \chi_\nu I_\nu \quad (\text{II.31})$$

**Géométrie plan parallèle** Si maintenant l'épaisseur de l'atmosphère est petite devant le rayon de l'étoile, autrement dit que la courbure est faible, un rayon lumineux qui traverse l'atmosphère fera un angle invariant  $\vartheta$  avec la normale, indépendamment de la profondeur où il est. L'équation se simplifie donc en géométrie plan parallèle à :

$$\mu \frac{dI_\nu}{dr} = \eta_\nu - \chi_\nu I_\nu \quad (\text{II.32})$$

### Profondeur optique et fonction source

Afin de définir des grandeurs physiques adaptées au transfert radiatif, comme une échelle prenant en compte l'opacité du milieu, ou le résultat de la compétition entre émission et absorption, nous allons introduire deux variables très utiles : la profondeur optique et la fonction source.

**Profondeur optique** L'équation (II.32) est une équation différentielle dont la variable est la profondeur géométrique. Cependant, si le milieu traversé est très hétérogène de par son opacité, la variation de l'intensité est peu corrélée à l'épaisseur géométrique qu'elle traverse. En revanche, elle va être corrélée au libre parcours moyen des photons. Sachant que le libre parcours moyen des photons dans le milieu est  $\chi_\nu^{-1}$ , on peut construire une échelle qui se contracte en fonction de la « transparence » en posant  $d\tau_\nu = -\chi_\nu ds$ , et que l'on appelle l'épaisseur optique. Avec cette nouvelle variable on construit la profondeur optique avec les conventions  $r = r^{\max} \Rightarrow \tau_\nu = 0$  et  $r = r^{\min} \Rightarrow \tau_\nu = \tau_\nu^{\max}$ .

Ainsi la profondeur optique s'écrit :

$$\tau_\nu(r) = - \int_{r^{\min}}^{r^{\max}} \chi_\nu(r') dr' \quad (\text{II.33})$$

**Fonction source** Une des quantités les plus importantes dans l'étude du transfert radiatif est la fonction source définie comme le rapport des coefficients d'émission et d'extinction.

$$S_\nu = \eta_\nu / \chi_\nu \quad (\text{II.34})$$

Dans le cas où l'on considère dans les processus d'absorption et d'émission une diffusion cohérente avec une fonction de phase isotrope (voir équation (II.22)), et le continu à l'ETL, la fonction source se développe :

$$S_\nu = \left( \frac{r_\nu + \varepsilon_\nu \phi_\nu}{r_\nu + \phi_\nu} \right) B_\nu + \left( \frac{(1 - \varepsilon_\nu) \phi_\nu}{r_\nu + \phi_\nu} \right) \bar{J}_\nu = \xi_\nu B_\nu + (1 - \xi_\nu) \bar{J}_\nu \quad (\text{II.35})$$

où  $r_\nu = \chi^{\text{Cont}} / \chi^{\text{Raie}}$  et  $\varepsilon_\nu$  la probabilité de destruction d'un photon :

$$\varepsilon_\nu = \frac{C_{ul}}{C_{ul} + A_{ul}(1 - e^{-h\nu_{ul}/k_B T})} \simeq \frac{C_{ul}}{C_{ul} + A_{ul}} \quad (\text{II.36})$$

Avec  $C_{ul}$  la probabilité par unité de temps d'une transition collisionnelle du niveau  $u$  vers le niveau  $l$ .

L'introduction de la profondeur optique et de la fonction source nous permet de réécrire l'équation de transfert sous sa forme canonique dans le cas plan parallèle :

$$\mu \frac{dI_\nu}{d\tau_\nu} = I_\nu - S_\nu \quad (\text{II.37})$$

### II.1.4 Solution formelle

Une fois posée avec les hypothèses et simplifications que nous avons développées plus haut, il est nécessaire de déterminer la solution de l'équation de transfert. Cependant, malgré son apparente simplicité (ODE du premier ordre), cette équation peut se révéler extrêmement complexe à résoudre. En effet, rappelons que la fonction source dépend de  $\mathcal{J}_\nu$  et donc de  $I_\nu$  via la diffusion et les populations. En d'autres termes, cette équation est certes formellement linéaire, mais la résoudre consiste à traiter un problème non-linéaire.

Dans cette section, nous allons calculer la solution formelle de l'équation de transfert. Le terme « formelle » suggère que cette solution, bien qu'effective, n'est exploitable que si l'on connaît déjà la fonction source. Il y a différentes manières de déterminer la solution formelle d'une ODE.

Pour anticiper la nouvelle méthodologie explicitée au III, nous allons la déterminer en utilisant les fonctions de Green. D'un point de vue général, on peut utiliser les fonctions de Green pour résoudre toutes les équations différentielles de la forme  $\mathcal{L}f(x) = g(x)$  où  $\mathcal{L}$  est un opérateur différentiel linéaire.

Plutôt que de déterminer directement la fonction  $f(x)$  dépendant d'une « distribution de charge » qu'est le terme source  $g(x)$ , on va résoudre  $\mathcal{L}\mathcal{G}(x, s) = \delta(x - s)$  soit la même équation que précédemment mais pour une « charge » ponctuelle localisée au point  $s$ . La solution de cette équation  $\mathcal{G}(x, s)$  est la fonction de Green de notre équation. Enfin, comme l'opérateur est linéaire on peut utiliser le principe de superposition pour remonter à la solution  $f(x)$  :

$$f(x) = \int g(s) \mathcal{G}(x, s) ds \quad (\text{II.38})$$



L'équation de transfert en plan parallèle est :

$$\mu \frac{dI_\nu}{d\tau_\nu} = I_\nu - S_\nu \Leftrightarrow \left[ 1 - \mu \frac{d}{d\tau_\nu} \right] I_\nu = S_\nu \quad (\text{II.39})$$

On remplace dans l'équation ci-dessus l'inconnue par la fonction de Green et le terme source par un Dirac.

$$\left[ 1 - \mu \frac{d}{d\tau_\nu} \right] \mathcal{G}_{\mu\nu}(\tau_\nu, t) = \delta(\tau_\nu - t) \quad (\text{II.40})$$

Pour résoudre l'équation (II.40) on en détermine la transformée de Laplace

$$\mathcal{L}[\mathcal{G}_{\mu\nu}(\tau_\nu, t); s] - \mu \mathcal{L} \left[ \frac{d}{d\tau_\nu} \mathcal{G}_{\mu\nu}(\tau_\nu, t); s \right] = \mathcal{L}[\delta(\tau_\nu - t); s] \quad (\text{II.41})$$

L'équation différentielle (II.39) se réduit donc à une équation algébrique dont l'inconnue est la fonction  $\tilde{\mathcal{G}}_{\mu\nu}(s, t) = \mathcal{L}[\mathcal{G}_{\mu\nu}(\tau_\nu, t); s]$ .

$$\tilde{\mathcal{G}}_{\mu\nu}(s, t) - \mu(s \tilde{\mathcal{G}}_{\mu\nu}(s, t) - \mathcal{G}_{\mu\nu}(0, t)) = e^{-ts} \quad (\text{II.42})$$

$$\tilde{\mathcal{G}}_{\mu\nu}(s, t) = \frac{e^{-ts}}{(1 - \mu s)} + \frac{\mathcal{G}_{\mu\nu}(0, t) \mu}{(1 - \mu s)} \quad (\text{II.43})$$

On obtient la solution en déterminant la transformée de Laplace inverse de  $\tilde{\mathcal{G}}_{\mu\nu}(s, t)$ .

$$\mathcal{G}_{\mu\nu}(\tau_\nu, t) = \mathcal{L}^{-1} \left[ \frac{e^{-ts}}{(1 - \mu s)}; \tau_\nu \right] + \mathcal{L}^{-1} \left[ \frac{\mathcal{G}_{\mu\nu}(0, t) \mu}{(1 - \mu s)}; \tau_\nu \right] \quad (\text{II.44})$$

$$= \mathcal{G}_{\mu\nu}(0, t) e^{\tau_\nu / \mu} - \frac{1}{\mu} e^{\frac{\tau_\nu - t}{\mu}} H(-t + \tau_\nu) \quad (\text{II.45})$$

En appliquant l'équation (II.38) dans le cas d'une atmosphère semi-infinie avec pour condition de bord  $I(0) = 0$  et en notant que  $I(0) = \int \mathcal{G}_{\mu\nu}(0, t) S(t) dt = 0 \Rightarrow \mathcal{G}_{\mu\nu}(0, t) \equiv 0$  on obtient alors la solution formelle de l'équation de transfert :

$$I(\tau_\nu, \mu) = \int_0^\infty (-t + \tau_\nu) S(t) e^{-\frac{t - \tau_\nu}{\mu}} \frac{dt}{\mu} \quad (\text{II.46})$$

si l'on regarde les cas  $\mu = +|\mu| \Rightarrow t > \tau_\nu$  et  $\mu = -|\mu| \Rightarrow t < \tau_\nu$ , on a :

$$I(\tau_\nu, +|\mu|) = \int_{\tau_\nu}^{\infty} S(t) e^{\frac{\tau_\nu - t}{\mu}} \frac{dt}{|\mu|} \quad (\text{II.47})$$

$$I(\tau_\nu, -|\mu|) = \int_0^{\tau_\nu} S(t) e^{-\frac{\tau_\nu - t}{\mu}} \frac{dt}{|\mu|} \quad (\text{II.48})$$

Ajoutons par ailleurs que si la fonction source est indépendante de  $\mu$  ce qui est le cas pour un milieu isotrope et a fortiori en plan parallèle, on peut déterminer  $\mathcal{J}_\nu$  par intégration sur les angles solides (soit  $\mu$  à 1D) :

$$\mathcal{J}_\nu(\tau_\nu) = \frac{1}{2} \int_{-1}^1 \int_0^{\infty} S(t) \mathcal{G}_{\mu\nu}(\tau_\nu, t) dt d\mu \quad (\text{II.49})$$

$$= \frac{1}{2} \int_0^{\infty} S(t) \left[ \int_{-1}^1 \mathcal{G}_{\mu\nu}(\tau_\nu, t) d\mu \right] dt \quad (\text{II.50})$$

$$= \frac{1}{2} \int_0^{\infty} S(t) \left[ \int_0^1 \frac{e^{\varepsilon_{\tau_\nu}(t) \frac{t - \tau_\nu}{\mu}}}{\mu} d\mu \right] dt = \frac{1}{2} \int_0^{\infty} S(t) E_1(|t - \tau_\nu|) dt \quad (\text{II.51})$$

où,  $\varepsilon_{\tau_\nu}(t) = 1$  si  $t < \tau_\nu$  et  $\varepsilon_{\tau_\nu}(t) = -1$  si  $t > \tau_\nu$

On remarque que l'on retrouve l'équation de Schwarzschild-Milne dont le noyau (*kernel*)  $E_1|t - \tau_\nu|$  est une intégrale sur les angles solides de la fonction de Green de l'équation de transfert. Nous nous servirons de cette constatation au chapitre III.

Une des approximations les plus communes en transfert radiatif dans les atmosphères stellaires est l'ETL. Comme nous l'avons vu précédemment, à l'ETL la fonction source est connue :  $S(\tau_\nu) = B(T(\tau_\nu))$ . Elle ne dépend donc que de la température cinétique du gaz à la profondeur optique  $\tau_\nu$ .

## II.2 Aspects hors ETL

La validité de l'interprétation d'un certain nombre de problèmes dans les spectres, tel que les mécanismes en jeu dans les étoiles, peut être liée au transfert radiatif lui-même si le traitement de ce dernier intègre des approximations qui se révèlent erronées. Une des approximations les plus courantes est l'équilibre thermodynamique local.

Comme son nom l'indique l'équilibre thermodynamique local signifie que l'on peut définir dans une zone de l'espace l'équilibre thermodynamique et donc une température unique pour toutes les espèces présentes, qu'il s'agisse des espèces chimiques ayant une certaine température cinétique, ou bien des photons ayant la température d'un corps noir. L'hypothèse d'équilibre est vérifiée quand toutes ces températures sont identiques. Mais cela implique que les photons entrant dans cette zone ne proviennent pas d'une zone à une autre température, ou alors qu'ils ont eu le temps d'être thermalisés. À noter que la dépendance en  $\nu$  est à l'origine du « *line blanketing* » comme de l'effet de serre.

Un indicateur intéressant pour définir l'ETL est la longueur de thermalisation d'un photon  $\ell_\nu^{\text{therm}}$ , longueur nécessaire pour qu'un photon transmis communique son énergie au gaz via des désexcitations collisionnelles et donc de l'énergie cinétique. Ce dernier est alors thermalisé.

Pour définir cette longueur, on introduit le libre parcours moyen  $l_\nu$  pour qu'un photon subisse une absorption radiative ou une diffusion et  $\mathcal{L}_\nu$  le libre parcours moyen avant une destruction collisionnelle.

Si la probabilité de diffusion radiative est grande devant les collisions ( $A_{ij} \gg C_{ij}$ ), le photon subira de multiples absorptions/émissions avant d'être détruit collisionnellement et  $\mathcal{L}_\nu \gg l_\nu$ . Ainsi, le photon effectuera une marche aléatoire dans une sphère de rayon  $\ell_\nu^{\text{therm}}$  avant d'être thermalisé.

$$\ell_\nu^{\text{therm}} = l_\nu \sqrt{n} = l_\nu \sqrt{\mathcal{L}_\nu / l_\nu} = \sqrt{l_\nu \mathcal{L}_\nu} \quad (\text{II.52})$$

Si les variations de température du gaz sont faibles dans cette sphère, alors les photons et

le gaz ont la même température, et le milieu est à l'équilibre thermodynamique local. En revanche, dans la haute atmosphère la longueur de thermalisation augmentent car  $l_\nu$  et  $\mathcal{L}_\nu$  augmentent dans le sens inverse de la densité, des photons non thermalisés arrivent de zones où règnent des températures différentes, le milieu est donc hors équilibre.

La longueur de thermalisation est donc un bon moyen de comprendre intuitivement la notion d'équilibre thermodynamique local, mais elle ne donne pas une vision quantitative des écarts à l'ETL.

### II.2.1 Équilibre statistique

Afin d'introduire à la fois un bon indicateur de l'écart à l'ETL et la méthode du chapitre III, nous allons détailler les équations qui rendent compte de la compétition entre processus radiatifs et collisionnels, et la réponse du milieu à cette compétition.

Les équations de l'équilibre statistique décrivent les populations d'une espèce chimique donnée sur ses niveaux d'énergie. Ainsi pour un niveau donné, les atomes ou molécules vont subir des transitions liées-liées qui peuvent être radiatives (spontanées ou induites) ou collisionnelles vers un niveau différent.

Si l'on connaît les probabilités de transition par unité de temps d'un niveau vers les autres par l'intermédiaire de ces deux types de processus, on peut calculer la variation de la population  $n_i$  d'un niveau  $i$  en faisant un « *bilan détaillé* » de ce qui part et de ce qui arrive sur le niveau. Ainsi, on a :

$$\begin{aligned} \frac{dn_i}{dt} = n_i & \left[ \sum_{j < i}^N A_{ij} + \sum_{j \neq i}^N (B_{ji} \bar{J}_{ji} + C_{ji}(T)) \right] \\ & - \left[ \sum_{j > i}^N n_j A_{ji} + \sum_{j \neq i}^N n_j (B_{ij} \bar{J}_{ij} + C_{ij}(T)) \right] \end{aligned} \quad (\text{II.53})$$

Si l'on considère que ces transitions sont très rapides devant les variations des conditions du milieu et de la chimie de l'espèce, après une courte phase transitoire, les

populations vont tendre vers un état stationnaire et  $\frac{dn_i}{dt} = 0$ . On obtiens alors les  $N$  équations de l'équilibre statistique (ES).

Ce système linéaire est dégénéré. En effet pour  $N = 2$  par exemple, on comprend bien que ce qui part d'un niveau va sur l'autre et inversement, si bien qu'une équation est l'opposée de l'autre. Pour lever cette dégénérescence, il suffit de substituer à une des équations de l'ES une équation de conservation pour fermer le système ( $\sum_{i=1}^N n_i = n$ ) (voir des contraintes telles que la conservation de la charge).

En général, les équations de l'équilibre statistique n'admettent pas de solution analytique. En revanche, le cas limite qui correspond à l'ETL en admet une. Si les collisions dominant sur les transitions radiatives  $C_{ij} \gg A_{ij} + B_{ij}\bar{J}_{ij}$  soit parce que la densité de collisionneurs est forte, soit parce que le champ de rayonnement  $\bar{J}_{ij}$  vu par l'atome ou la molécule est faible, l'équilibre statistique se simplifie en négligeant les coefficients radiatifs. Dans ce cas, sachant que  $C_{ji} = C_{ij} \times \frac{g_i}{g_j} e^{(\chi_i - \chi_j)/k_B T}$  le système admet une solution analytique.

$$n_i = n \frac{g_i}{u(T)} e^{-\chi_i/k_B T} \quad (\text{II.54})$$

où  $\chi_i$  est l'énergie d'excitation du niveau  $i$  et  $u(T) = \sum_{i=1}^N g_i e^{-\chi_i/k_B T}$  la fonction de partition.

Cette solution est la distribution de Boltzmann, et elle ne dépend que de la température cinétique du gaz. Elle définit même ce que l'on appelle la température d'une espèce chimique. Pour bien comprendre que cela correspond à l'ETL, la fonction source pour un processus discret vaut alors :

$$S_\nu^{\text{Raic}} = \frac{\eta_\nu^{\text{bb}}}{\chi_\nu^{\text{bb}}} = \frac{2h\nu^3}{c^2} \frac{\varphi_\nu/\phi_\nu}{\frac{g_u n_l}{g_l n_u} - \psi_\nu/\phi_\nu} \quad (\text{II.55})$$

Si l'on admet la redistribution complète ( $\psi_\nu = \phi_\nu = \varphi_\nu$ ) en fréquences et en substituant la distribution de Boltzmann dans l'expression de la fonction source, on obtient :

$$S_\nu^{\text{Raic}} = \frac{2h\nu^3}{c^2} \frac{1}{e^{h\nu/k_B T} - 1} \equiv B_\nu(T) \quad (\text{II.56})$$

Le rayonnement et le gaz ont donc la même température  $T$ , ce qui correspond bien à l'ETL.

On voit bien ici que le critère dominant est le rapport entre la probabilité de transition radiative sur la probabilité de transition collisionnelle.

## II.2.2 Conditions physiques et densité critique

Qu'en est-il de la compétition entre les processus radiatifs et collisionnels dans la photosphère, et donc des écarts possibles à l'ETL ? Le rapport pour un niveau  $i$  donné, entre la probabilité qu'il se désexcite spontanément par voie radiative sur la probabilité de désexcitation collisionnelle est :

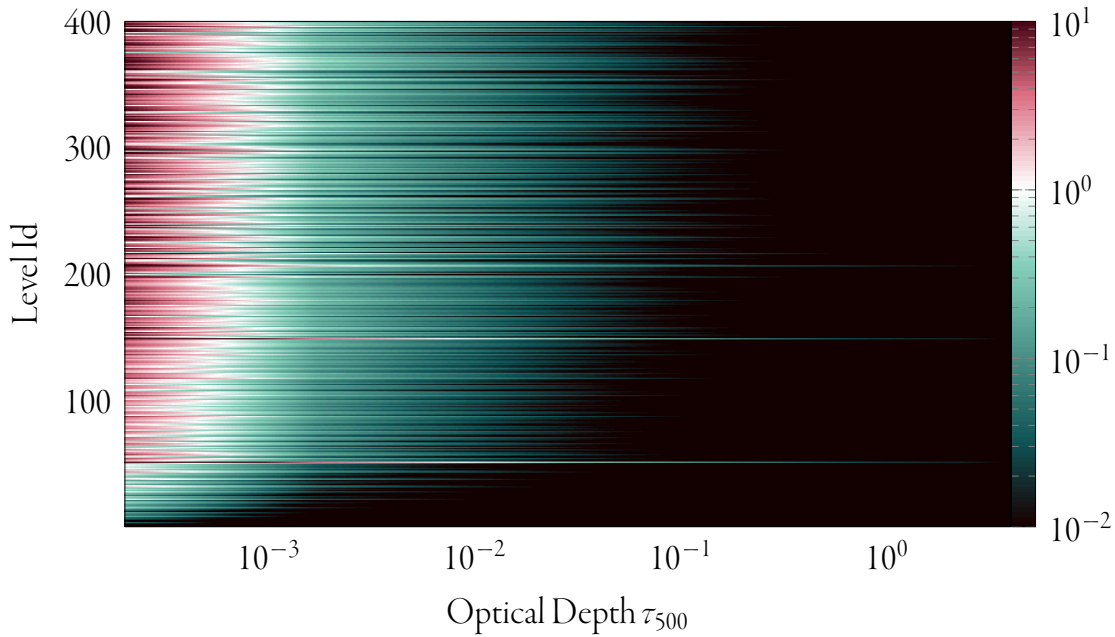
$$\eta_i = \frac{\sum_{j=1}^{i-1} A_{ij}}{\sum_{j=1}^{i-1} C_{ij}} = \frac{\sum_{j=1}^{i-1} A_{ij}}{n_{\text{col}} \sum_{j=1}^{i-1} \gamma_{ij}(T)} = \frac{n_{\text{cri}}}{n_{\text{col}}} \quad (\text{II.57})$$

où  $n_{\text{cri}}$  est la densité critique, et  $n_{\text{col}}$  la densité du collisionneur.

Si  $\eta_i \gg 1$ , alors les transitions radiatives dominent sur les collisions et il est nécessaire de résoudre l'équilibre statistique, la distribution s'écarte de la distribution de Boltzmann, et l'on peut affirmer que les conditions sont hors ETL. De même si l'on a  $\eta_i \simeq 1$ , il y a compétition entre transition radiatives et collisionnelles et donc des conditions hors ETL. En revanche si  $\eta \ll 1$  il y a équilibre entre la matière et le rayonnement  $T_{\text{ex}} = T_{\text{rad}}$  et donc l'hypothèse de l'ETL est valide (sauf si  $C_{ij} \leq B_{ij} \bar{J}_{ij}$ ).

Afin, de quantifier cette déviation à l'ETL dans l'atmosphère d'une RSG, on prend un modèle MARCS de supergéante et l'on trace  $\eta_i(\tau_{500})$  dans l'atmosphère (Fig. II.3). On note que les conditions pour  $\text{H}_2\text{O}$  sont très hors ETL, et que ces conditions imposent un traitement rigoureux du transfert radiatif pour comprendre correctement la formation de ces raies. En effet elles se forment probablement dans la haute atmosphère là où l'écart à l'ETL est le plus important.

En ce qui concerne les zones où  $\eta_i \gg 1$  on peut d'ores et déjà, sans anticiper sur les résultats d'un calcul complet, imaginer que pour les supergéantes dont la luminosité est



**FIGURE II.3** –  $\eta[\text{H}_2\text{O}]$  dans l’atmosphère d’une RSG (Type  $\alpha$  Ori) avec  $\text{H}_2$  comme collisionneur. On remarque que dans la haute atmosphère ( $\tau_{500} > 10^{-2}$ ) le rapport entre densité critique et la densité de collisionneur est grand devant 1. Cela implique que les conditions y sont très hors ETL.

très importante, le terme  $B_{ij}\bar{J}_{ij}$  que nous avons négligé est potentiellement important, et que par conséquent il est possible que les écarts à l’ETL restent importants dans cette zone là aussi.

### II.2.3 Non-localité et non-linéarité

Afin de conclure sur les aspects hors ETL, mettons en exergue les difficultés intrinsèques que pose la résolution de l’équation de transfert dans le cas hors ETL.

Comme nous l’avons mentionné auparavant, l’écart à l’ETL correspond à un découplage des propriétés du rayonnement et du gaz. Dès lors, il est nécessaire de prendre en compte le couplage entre deux types de phénomènes qui s’influencent mutuellement et qui sont régis par des équations différentes :

D’une part, les propriétés de la matière qui est « locale » et qui détermine la valeur de la

fonction source que l'on détermine en résolvant les équations de l'équilibre statistique. D'autre part, les propriétés du rayonnement solution d'une équation de transport, donc « globale » mais dépendant de la fonction source. Cependant ces deux caractéristiques s'influencent et se couplent par l'intermédiaire du rayonnement via  $\bar{J}$  dans les équations de l'équilibre statistique et donc la fonction source, puisqu'elle conditionne la solution de l'équation de transfert. Ce couplage local-global confère au traitement de l'équation de transfert sa propriété de non-localité qui, nous le verrons par la suite, pose un certain nombre de difficultés dans le traitement numérique de cette problématique. C'est seulement à l'ETL que la fonction source ne dépend plus du transfert, mais seulement de la température (locale) du gaz.

Comme nous le voyons, la dépendance de l'équilibre statistique en  $\bar{J}$  est le nœud du problème. En effet, nous voyons à travers l'équation (II.51) que la non localité du transfert apparaît à travers l'intégrale sur l'espace, et la non-linearité dans la dépendance en  $E_1$  de la variable spatiale.

La conjugaison de ces deux propriétés impose souvent un traitement itératif du transfert radiatif hors ETL (ALI, ...) <sup>1</sup>, ou le cas échéant des simplifications permettant de « localiser » le transfert (méthodes LVG par exemple).

## II.3 Méthodes de résolution classique

### II.3.1 Probabilité d'échappement

Une méthode approchée permettant de « résoudre » le transfert hors ETL est la méthode de la probabilité d'échappement. Son avantage est qu'elle permet de découpler le traitement du transfert et de l'équilibre statistique. Ce découplage est possible si l'on définit arbitrairement la probabilité  $\beta_j$  d'un photon émis à un point donné de s'échapper du milieu sans subir d'absorption ou de diffusion (nous discuterons par la suite de

---

1. Il existe des techniques tel que la linéarisation complète qui ne sont pas itératives (voir Auer & Mihalas, 1969)



la possibilité de calculer physiquement cette probabilité).

En se rappelant que le libre parcours moyen d'un photon de fréquence  $\nu$  est  $\frac{1}{\chi_\nu}$ , cette probabilité est :

$$\beta_\nu = \exp(-|\tau_\nu|) \quad (\text{II.58})$$

La moyenne dans toutes les directions des photons émis dans une raie ayant un profil  $\phi_\nu$  et intégrée sur ce profil est donc :

$$\bar{\beta}_{\nu_0} = \frac{1}{4\pi} \oint d\omega \int_0^\infty \phi_\nu \beta_\nu d\nu \quad (\text{II.59})$$

Ce traitement probabiliste du transfert est relié aux grandeurs classiques ( $S_\nu$ ) par :

$$\bar{\beta} = \frac{\text{nombre de photons émergents}}{\text{nombre de photons émis}} = \frac{\int S(\tau_\nu) \beta(\tau_\nu) d\tau_\nu}{\int S(\tau_\nu) d\tau_\nu} \quad (\text{II.60})$$

Comme nous l'avons dit précédemment, l'intérêt des méthodes de probabilité d'échappement est sa capacité à découpler le transfert du calcul de l'équilibre statistique. En introduisant  $\rho$  (appelé en anglais « *the net radiative bracket* »), qui correspond à la fraction d'émission non compensée par l'absorption du champ diffusé :

$$\rho_{ij} = 1 - \frac{\bar{J}_{ij}}{S_{ij}} \Leftrightarrow \bar{J}_{ij} = (1 - \rho_{ij}) S_{ij} \quad (\text{II.61})$$

on peut réécrire l'équilibre statistique (Eq. (II.53)) sous la forme :

$$n_i = \sum_{i < j} C_{ij}(T) - \sum_{i > j} n_i (A_{ij} \rho_{ij} + n_{col} C_{ij}(T)) \quad (\text{II.62})$$

Tel quel, l'introduction de  $\rho$  n'as pas d'intérêt puisque il dépend explicitement de  $\bar{J}$ . Cependant, en valeur moyenne, il est possible d'identifier ce paramètre à la probabilité d'échappement.

En effet, la solution formelle de l'équation de transfert permet d'écrire que l'intensité émergente est :

$$I_\nu = \int_0^{T_\nu} S_\nu e^{-\tau_\nu} d\tau_\nu = \int_0^{T_\nu} S_\nu \beta_\nu d\tau_\nu \quad (\text{II.63})$$

Où  $T_\nu$  est l'épaisseur optique totale traversée par le rayon lumineux. Par ailleurs, l'intégration directe de l'équation de transfert nous donne :

$$I_\nu = \int_0^{T_\nu} (S_\nu - I_\nu) d\tau_\nu \quad (\text{II.64})$$

En égalisant les équations (II.63) et (II.64) on obtient donc :

$$\int_0^{T_\nu} S_\nu \left( 1 - \frac{I_\nu}{S_\nu} \right) d\tau_\nu = \int_0^{T_\nu} S_\nu \beta_\nu d\tau_\nu \Rightarrow \left\langle 1 - \frac{I_\nu}{S_\nu} \right\rangle = \langle \beta_\nu \rangle \quad (\text{II.65})$$

Ce qui, après intégration sur les fréquences et les angles solides, donne :

$$\langle \rho \rangle = \langle \bar{\beta} \rangle \quad (\text{II.66})$$

Cette égalité est connue sous le nom de théorème d'Irons (voir Irons, 1978), elle est la clé du découplage car il permet de substituer au « *net radiative bracket* » une expression de la probabilité d'échappement dans les équations de l'équilibre statistique et donc de dissocier le calcul du transfert de celui de la fonction source. On peut retrouver ce résultat sans moyenne en faisant l'hypothèse que la fonction source varie peu. En effet, dans l'expression de Schwarzschild-Milne (II.51), le *kernel*  $E_1(t)$  décroît rapidement (de manière monotone) bien plus rapidement que la fonction source. Ainsi, en utilisant le théorème de la valeur moyenne, on peut sortir la fonction source de l'intégrale ( $\langle S(t) \rangle = S(\tau_\nu)$ ) et intégrer alors l'équation (II.51), ce qui donne :

$$\mathcal{J}_\nu(\tau_\nu) = \left[ 1 - \frac{1}{2}E_2(\tau_\nu) - \frac{1}{2}E_2(\tau_\nu^{\text{Max}} - \tau_\nu) \right] S_\nu(\tau_\nu) = [1 - (\beta_\nu^+ + \beta_\nu^-)] S_\nu(\tau_\nu) \quad (\text{II.67})$$

Pour calculer  $\bar{\mathcal{J}}$ , on intègre l'équation (II.67) pondérée par un profil de raie  $\phi_\nu$  (en supposant l'hypothèse de complète redistribution). On a :

$$\bar{\mathcal{J}}_{\nu_0}(\tau_\nu) = \left[ 1 - \frac{1}{2}K_2(\tau_\nu^{\text{Max}} - \tau_\nu) - \frac{1}{2}K_2(\tau_\nu) \right] S_{\nu_0}(\tau_\nu) = [1 - (\bar{\beta}^+ + \bar{\beta}^-)] S_{\nu_0}(\tau_\nu) \quad (\text{II.68})$$

où  $K_2$  est la fonction définie par Avrett & Hummer (1965). L'identification avec l'équation (II.66) donne immédiatement :

$$\rho(\tau_\nu) = \bar{\beta}^+(\tau_\nu) + \bar{\beta}^-(\tau_\nu) = \bar{\beta}(\tau_\nu) \quad (\text{II.69})$$

Cette identification de  $\beta$  et de  $\rho$  n'a d'intérêt que si l'on est en mesure de donner une expression de  $\beta$ . Cette expression dépend de la géométrie et de l'épaisseur optique mais pas du champ de rayonnement. Dans ce cas il est souvent impossible de définir une expression exacte et exploitable de  $\beta$ .

Pour ce qui est de la valeur moyenne de  $\beta_\nu$  dans la direction du rayon lumineux, (voir Elitzur, 1992), on peut dire que :

$$\langle \beta_\nu \rangle = \langle e^{-\tau_\nu} \rangle = \frac{1}{T_\nu} \int_0^{T_\nu} e^{-\tau_\nu} d\tau_\nu = \frac{1 - e^{-T_\nu}}{T_\nu} \quad (\text{II.70})$$

Mais cette expression formelle ne permet pas d'inclure les couplages non-locaux.

En ce qui concerne les géométries les plus utilisées, on peut donner quelques expressions approchées de  $\beta$  pour différentes géométries simplifiées (Avrett & Hummer (1965) en plan parallèle, Osterbrock (1974) pour une sphère uniforme). Dans un milieu statique et en géométrie plan parallèle on a respectivement pour des profils de raies de Doppler, de Voigt et de Lorentz et qui sont des approximations asymptotiques de  $\beta$  lorsque  $\tau \rightarrow \infty$  :

$$\beta^D(\tau) \simeq \frac{1}{4\tau\sqrt{\ln(\tau/\pi^{1/2})}} \quad (\text{II.71})$$

$$\beta^V(\tau) \simeq \frac{\sqrt{a}}{3\tau^{1/2}} \quad (\text{II.72})$$

$$\beta^L(\tau) \simeq \frac{1}{3\tau^{1/2}} \quad (\text{II.73})$$

Comme nous venons de le voir, il n'est pas aisé de déterminer une expression générique de la probabilité d'échappement exploitable, d'autant plus que son expression peut être affectée par le champ de vitesses, le profil d'absorption, etc...

En revanche dans certaines conditions limites sur le gradient de vitesse, on peut déterminer une expression analytique de la probabilité d'échappement.

**Méthode de Sobolev** Si un photon émis peut ainsi s'échapper sans subir d'absorption, ce peut être parce que le milieu est le siège d'un fort gradient de vitesse. Si après avoir franchi une distance  $\Delta S = L$ , que l'on appelle la longueur de Sobolev, la vitesse du milieu engendre un décalage Doppler plus large que la raie incidente, le photon incident ne soit pas absorbé (voir Sobolev, 1960). Pour que ces conditions soient remplies, le décalage Doppler doit être au moins égal à la largeur de la raie. Soit :

$$\Delta\nu = \Delta\nu_D \quad (\text{II.74})$$

$$\frac{\nu_0}{c} \left( \frac{dv}{ds} \right) \Delta s = \nu_0 \frac{v_{th}}{c} \quad (\text{II.75})$$

$$\Rightarrow L = \frac{v_{th}}{|dv/ds|} \quad (\text{II.76})$$

où, pour simplifier l'écriture, on se limite aux élargissements Doppler thermiques. Si l'échelle de variation des grandeurs physiques  $R$  est grande devant la longueur de Sobolev  $L \ll R$  on peut définir la probabilité d'échappement comme explicité ci-dessus. Cette méthode est particulièrement adaptée aux étoiles chaudes avec de forts vents radiatifs et donc de grands gradients de vitesse qui génèrent, entre autres, des profils de raies de type P Cygni.

### II.3.2 ALI : Jacobi, Gauss-Seidel, SOR

L'une des méthodes de transfert les plus utilisées aujourd'hui et qui contrairement aux méthodes de probabilité d'échappement est exacte (moyennant certaines hypothèses que nous décrirons), est sans aucun doute la méthode de l'itération Lambda accélérée (ALI, Accelerated Lambda Iteration) (voir Olson et al., 1986) et ses généralisations pour un système à plusieurs niveaux (MALI) (voir Rybicki & Hummer, 1991, 1992), ou encore Gauss-Seidel/SOR (voir Trujillo Bueno & Fabiani Bendicho, 1995 et Paley & Léger, 2007) qui sont basées sur le même mode de résolution. Ces méthodes sont par nature itératives et constituent un sujet de recherche encore très actif et dont les performances ne cessent d'augmenter. On ne donnera donc pas ci-après un point de

vue exhaustif sur ces méthodes, mais on explicitera sa philosophie, ses avantages et ses limites.

**Opérateur Lambda** Nous avons vu précédemment que la solution formelle de l'équation de transfert permet de dériver l'équation dite de Schwarzschild-Milne en plan parallèle :

$$\mathcal{J}_\nu(\tau_\nu) = \frac{1}{2} \int_0^T S(t) E_1(|t - \tau_\nu|) dt \quad (\text{II.77})$$

qui peut s'écrire en utilisant un opérateur :

$$\mathcal{J}_\nu(\tau_\nu) = \Lambda_\nu[S_\nu] \quad (\text{II.78})$$

Sachant que  $\bar{\mathcal{J}} = \int \mathcal{J}_\nu \varphi_\nu d\nu$  et en introduisant  $\bar{\Lambda} = \int \Lambda_\nu \varphi_\nu d\nu$ , il vient :

$$\bar{\mathcal{J}}(\tau_\nu) = \bar{\Lambda}[S_\nu] \quad (\text{II.79})$$

Afin que cette formulation soit exploitable numériquement, il est nécessaire de discrétiser les grandeurs en  $\tau$ . Ainsi, les fonctions  $\bar{\mathcal{J}}(\tau_\nu)$  et  $S_\nu(\tau_\nu)$  vont devenir des vecteurs  $\bar{\mathbf{J}}$  et  $\mathbf{S}$ . D'autre part, l'intégration associée à l'opérateur doit être convertie en somme discrète avec une certaine quadrature pour améliorer la précision. De ce fait l'opérateur  $\Lambda$  devient une matrice  $\bar{\Lambda}$ . L'intégration de  $S$  peut donc se réécrire sous forme matricielle, et l'équation (II.79) sous la forme :

$$\bar{\mathbf{J}} = \bar{\Lambda} \mathbf{S} \quad (\text{II.80})$$

**Cas de l'atome à deux niveaux** Un cas particulier très instructif est l'atome à deux niveaux. En effet, en plus d'être simple, ce problème admet une solution analytique (solution d'Eddington), ce qui permet d'évaluer la précision de la méthode.

Dans ce cas, la fonction source s'écrit :

$$S = (1 - \varepsilon) \bar{\mathcal{J}} + \varepsilon B \quad (\text{II.81})$$

Où  $B \equiv B_{\nu_{lu}}$  est la fonction de Planck au centre de la raie.

En combinant les équations (II.80) et (II.81) on peut alors écrire le système sous la forme :

$$\mathbf{S} = (1 - \varepsilon)\bar{\mathbf{A}}\mathbf{S} + \varepsilon\mathbf{B} \quad (\text{II.82})$$

Comme l'opérateur  $\bar{\mathbf{A}}$  est linéaire, il est inversible et l'on peut déterminer la fonction source en une seule étape. Cependant, si le système est de grande dimension, la matrice sera très grande et fortement couplée (non-localité). Les termes non-diagonaux de la matrice ne peuvent pas être négligés, l'inversion directe peut devenir numériquement très coûteuse voire prohibitive. L'idée d'une évaluation itérative qui permet d'éviter l'inversion de la matrice vient donc naturellement. Le schéma qui en résulte est la technique de la Lambda iteration :

$$\mathbf{S}^{k+1} = \mathbf{A}\mathbf{S}^k + \varepsilon\mathbf{B} \quad (\text{II.83})$$

où la matrice d'amplification est  $\mathbf{A} = (1 - \varepsilon)\bar{\mathbf{A}}$ . En revanche ce schéma n'est pas très intéressant. En effet, il est mal conditionné, et le nombre d'itérations nécessaires à la convergence peut le rendre inefficace. En effet, lorsque  $k \rightarrow \infty$ , le vecteur erreur  $\mathbf{e}^k$  de la méthode tend asymptotiquement vers la puissance  $k$ -ième du rayon spectral  $|\lambda_{\max}|^k$  de la matrice d'amplification (ici  $(1 - \varepsilon)\bar{\mathbf{A}}$ ), où  $\lambda_{\max}$  est la plus grande des valeurs propres de  $\mathbf{A}$ . Pour que la méthode soit efficace on a donc besoin d'un rayon spectral petit devant 1. Or tel que nous avons défini  $\bar{\mathbf{A}}$ , avec  $\phi_\nu$  Gaussien, le rayon spectral est tel que :

$$\lambda_{\max} \simeq \frac{1 - \varepsilon}{1 - T^{-1}} \quad (\text{II.84})$$

Or si  $T \gg 1$  et  $\varepsilon \ll 1$  le rayon spectral s'approche de 1 et le nombre d'itérations requis devient infini.

**Operator Splitting** Afin de pallier ce problème, il est possible d'améliorer le taux de convergence de la méthode en utilisant des techniques mathématiques qui ont pour effet d'améliorer le conditionnement de la matrice. Ce genre de technique a été

proposée pour la première fois dans le cadre du transfert par Cannon (1973a,b) et Scharmer (1981). En effet, si l'on introduit un opérateur approché  $\bar{\Lambda}^*$  tel que :

$$\bar{\Lambda} = (\bar{\Lambda} - \bar{\Lambda}^*) + \bar{\Lambda}^* \quad (\text{II.85})$$

on aboutit à un schéma du type :

$$\mathbf{S}^{k+1} = \mathbf{A}^\dagger \mathbf{S}^k + \varepsilon \mathbf{B} [1 - (1 - \varepsilon) \bar{\Lambda}^*]^{-1} \quad (\text{II.86})$$

où la matrice d'amplification est :

$$\mathbf{A}^\dagger = (1 - \varepsilon) [1 - (1 - \varepsilon) \bar{\Lambda}^*]^{-1} (\bar{\Lambda} - \bar{\Lambda}^*) \quad (\text{II.87})$$

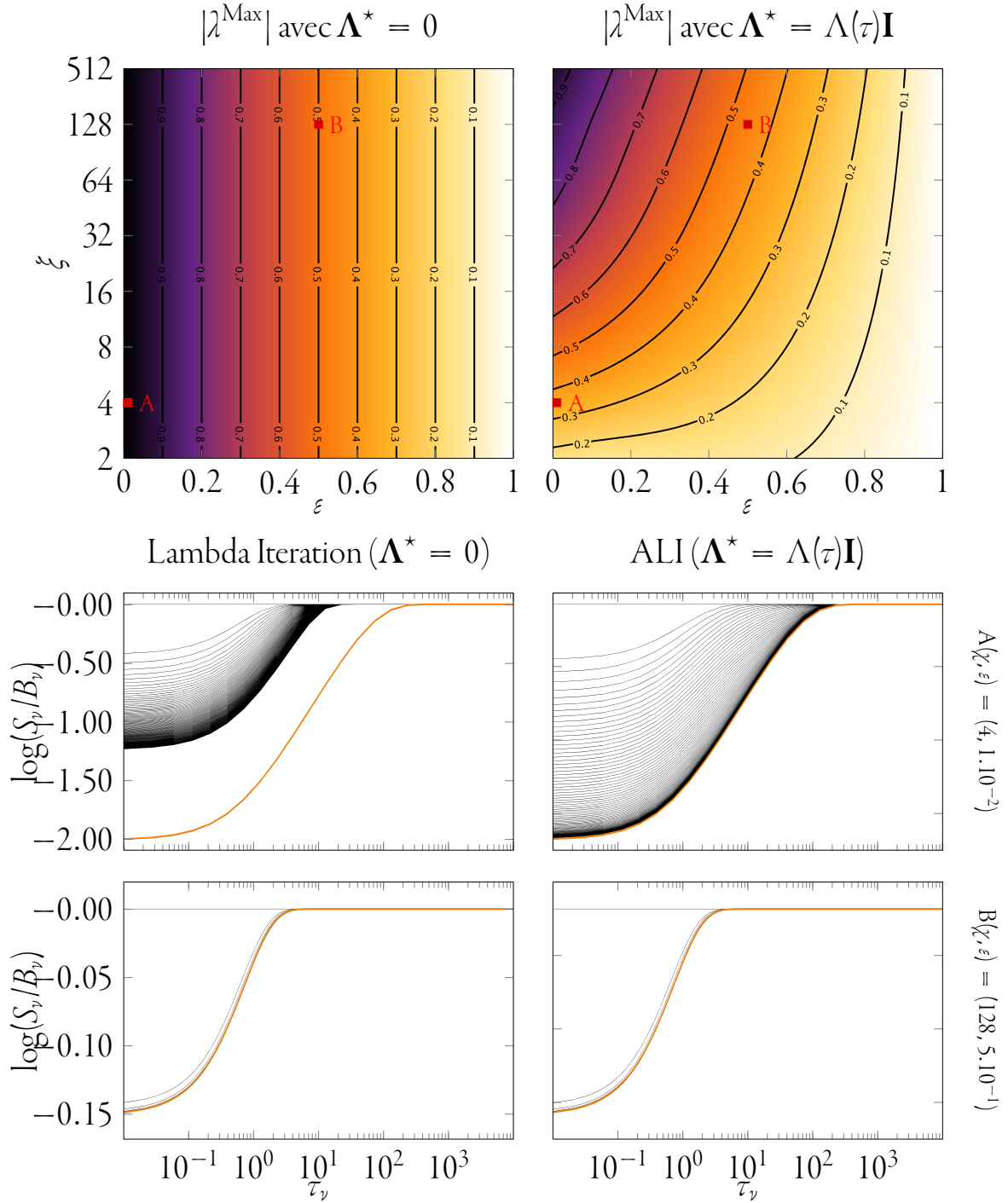
Plusieurs choix sont possibles pour l'opérateur  $\bar{\Lambda}^*$ . Les conditions que ce dernier doit remplir sont la rapidité et le faible coût numérique de son calcul, et que le rayon spectral de la matrice d'amplification qui résulte de ce choix soit petit devant 1 et qu'il accélère donc la convergence. Un choix possible est  $\bar{\Lambda}^* = \mathbf{diag}(\bar{\Lambda}_i)$  qui correspond à un opérateur local dont le produit avec  $\mathbf{S}$  donne la seule contribution locale du milieu à  $\bar{\mathbf{J}}$ . Il s'agit alors de la méthode de Jacobi (voir Olson et al., 1986).

D'un point de vue général on distingue les méthodes suivant la décomposition de l'opérateur que l'on considère. En effet, dans l'équation (II.85), on voit que l'on a  $\bar{\Lambda} = \mathbf{M} - \mathbf{N}$  avec  $\mathbf{M} = (\bar{\Lambda}^*)$  et  $\mathbf{N} = (\bar{\Lambda}^* - \bar{\Lambda})$ . Si l'on décompose l'opérateur en  $\bar{\Lambda} = \mathbf{L} + \mathbf{D} + \mathbf{U}$  où  $\mathbf{L}$ ,  $\mathbf{D}$ , et  $\mathbf{U}$  sont respectivement les matrices triangle inférieur, diagonal, et triangle supérieur, on a les méthodes suivantes en fonction du choix de décomposition de l'opérateur :

$$\text{si } \bar{\Lambda} = \mathbf{M} - \mathbf{N} \begin{cases} \text{Jacobi} & \text{si } \mathbf{M} = \mathbf{D} \text{ et } \mathbf{N} = -(\mathbf{L} + \mathbf{U}) \\ \text{Gauss-Seidel} & \text{si } \mathbf{M} = \mathbf{L} + \mathbf{D} \text{ et } \mathbf{N} = -\mathbf{U} \\ \text{SOR} & \text{si } \mathbf{M} = \frac{1}{\omega} \mathbf{L} + \mathbf{D} \text{ et } \mathbf{N} = -\mathbf{U} + \frac{1-\omega}{\omega} \mathbf{D} \end{cases}$$

où  $\omega$  est le facteur de relaxation ( $1 > \omega > 2$ ).

Dans les trois cas ci-dessus, on observe une diminution importante du rayon spectral par rapport à la Lambda itération classique et donc une accélération de la convergence (Fig. II.4).



**FIGURE II.4** – Cette figure montre pour deux choix de  $\bar{\Lambda}^*$  (ou la diagonale de  $\bar{\Lambda}^*$ ) qui correspondent respectivement à la Lambda itération et à la méthode de Jacobi, le rayon spectral de la matrice d'amplification en fonction de  $\varepsilon$  et  $\chi$ , et l'influence sur le taux de convergence de la méthode.



**Discussion** Ajoutons qu'il existe des techniques d'accélération de convergence tel que la méthode Ng par exemple (voir Ng, 1974 et Auer, 1987, 1991).

Cependant les méthodes itératives peuvent poser des problèmes si la taille du système est grand. On le voit dans la figure II.4, où le rayon spectral devient grand pour  $\chi$  grand. Cela est dû au fait que ces méthodes convergent bien si la diagonale est dominante, ce qui devient de moins en moins vrai lorsque la taille de la matrice deviens grande dans des conditions très hors ETL, car les contributions non-locales deviennent importantes.

Physiquement les itérations correspondent aux diffusions successives des photons dans le milieu et à leur propagation. Si le nombre de diffusions est grand, soit parce que le milieu est grand ou parce que  $\varepsilon$  est petit, malgré les méthodes d'accélération le nombre d'itérations peut devenir très grand (voir Mihalas, 1978 et Hubeny, 2001).

D'autre part, la complexité asymptotique du calcul par itération est intéressante à regarder. Pour l'inversion directe, le coût varie en  $n^3/3$  ce qui devient prohibitif pour des systèmes larges. Pour Jacobi ou Gauss-Seidel, le coût varie en  $n(n + 1) \simeq n^2$ . En ce qui concerne le nombre d'itérations et la précision, une quantification rigoureuse de ces aspects est développée par Chevallier et al. (2003) dans le cadre d'un code de transfert utilisant ALI. Il en résulte en particulier qu'outre le fait qu'un nombre important d'itérations est nécessaire dans certaines zones de l'espace des paramètres du problème, la précision de ALI ne peut être meilleure que le pourcent dans la haute atmosphère, lorsque  $\tau$  est inférieur à  $1/L$ .

**Deuxième partie**

**Nouvelle Méthodologie**



## MÉTHODE

*"Il n'y a pas une méthode unique pour étudier les choses."*

ARISTOTE

CHAPITRE III : MÉTHODE . . . . .	75
<b>III.1 Formulation analytique . . . . .</b>	<b>78</b>
III.1.1 Changement de variable . . . . .	78
III.1.2 Formulation analytique de $\bar{\mathcal{J}}_{ij}(\tau_V)$ . . . . .	79
III.1.3 Contributions à $\bar{\mathcal{J}}$ . . . . .	81
<b>III.2 Équilibre statistique . . . . .</b>	<b>83</b>
III.2.1 Forme matricielle . . . . .	83
III.2.2 Équilibre statistique multi-zones . . . . .	84
<b>III.3 Matrice Jacobienne . . . . .</b>	<b>85</b>
III.3.1 Dérivées du champ moyen . . . . .	87
III.3.2 Dérivées locales du champ moyen . . . . .	89
<b>III.4 Propriétés de la solution . . . . .</b>	<b>90</b>
III.4.1 Unicité et positivité de l'équilibre statistique local . . . . .	91
III.4.2 Questions ouvertes . . . . .	95



Comme nous l'avons vu au chapitre précédent, la résolution du transfert hors ETL peut s'avérer difficile pour des systèmes très larges, entre autre parce que la non-localité du système implique une résolution itérative dont la convergence dépend des conditions physiques. Les itérations nécessaires aux méthodes ALI sont dites stationnaires. À chaque itération l'on doit résoudre de nouveau l'équilibre statistique pour déterminer la fonction source.

Dans le chapitre qui suit nous allons nous affranchir de cette voie itérative. Pour ce faire, nous ne chercherons plus à déterminer la fonction source mais les populations sur les états d'excitation dans chaque couche. D'autre part, comme le transfert est non local, les populations à une certaine profondeur influenceront sur les populations partout ailleurs et vice-versa. Nous couplerons donc les équilibres statistiques de toutes les couches de notre modèle dans le but d'obtenir un système de  $N \times P$  équations, où  $N$  est le nombre de niveaux considérés et  $P$  le nombre de couches après discrétisation du modèle d'atmosphère considéré. L'inversion de ce système nous donnera accès aux populations et donc à la fonction source en tout point du modèle. Cependant, ce système, contrairement à  $\bar{\mathbf{J}} = \mathbf{A}\mathbf{S}$ , ne sera pas linéaire, son inversion sera donc faite par voie itérative. Mais contrairement aux méthodes ALI, sa résolution ne dépendra pas des conditions physiques. D'autre part, nous n'utiliserons pas des méthodes itératives statiques mais des méthodes de type sous-espace de Krylov, qui comme nous le verrons seront particulièrement appropriées à ce système.

## III.1 Formulation analytique

### III.1.1 Changement de variable

Comme nous souhaitons résoudre les équations d'équilibre statistique il est nécessaire de déterminer  $\bar{J}$ , pour toutes les couches et toutes les transitions. D'autre part,  $\bar{J}$  dépend de  $\tau_\nu$  et de  $S_\nu$ , et donc des populations qui vont être nos inconnues.

En suivant les préconisations de Gonzalez Garcia et al. (2008), la première étape consiste donc à réécrire l'équation de transfert avec une dépendance explicite aux populations et d'autre part une variable spatiale unique pour coupler toutes les équations d'équilibre statistique.

En partant de l'équation (II.32) en géométrie plan parallèle, et en considérant une composante continue et une discrète pour  $\chi_\nu$  (les transitions de  $\text{H}_2\text{O}$  dans ce qui suit), on peut réécrire l'équation de transfert :

$$\mu \frac{dI_\nu}{dr} = \eta_\nu^{\text{Cont}} + \eta_\nu^{\text{Raie}} - (\chi_\nu^{\text{Cont}} + \chi_\nu^{\text{Raie}}) I_\nu \quad (\text{III.1})$$

En utilisant les équations (II.18), (II.12) et (II.25) et en divisant l'équation (III.1) par  $\chi_V = \tilde{\chi}_V n_{\text{H}}$  où  $V$  correspond à la bande visible ( $V \simeq 500 \text{ nm}$ ) on a :

$$\begin{aligned} \mu \frac{dI_{\nu ij}}{dr \chi_V} = & \left[ \frac{\tilde{\chi}_{\nu ij}^{\text{Cont}}}{\tilde{\chi}_V} + \frac{h\nu_{ij}}{4\pi} B_{ij} g_i \left( \frac{n_{\text{H}_2\text{O}fj}}{g_j} - \frac{n_{\text{H}_2\text{O}fi}}{g_i} \right) \frac{1}{\tilde{\chi}_V n_{\text{H}}} \phi_\nu \right] I_\nu \\ & - \frac{h\nu_{ij}}{4\pi} A_{ij} g_i \frac{n_{\text{H}_2\text{O}fi}}{g_i} \frac{1}{\tilde{\chi}_V n_{\text{H}}} - \frac{\tilde{\eta}_\nu^{\text{Cont}}}{\tilde{\chi}_V} B_\nu(T) \end{aligned} \quad (\text{III.2})$$

En posant  $\xi_\nu = \frac{\tilde{\chi}_\nu^{\text{Cont}}}{\tilde{\chi}_V}$ ,  $\zeta = \frac{1}{\tilde{\chi}_V} \frac{n_{\text{H}_2\text{O}}}{n_{\text{H}}}$ ,  $E_{ij} = \frac{h\nu_{ij}}{4\pi} B_{ij} g_i$ ,  $D_{ij} = \frac{h\nu_{ij}}{4\pi} A_{ij} g_i$ , et  $x_i = \frac{n_i/n_{\text{H}_2\text{O}}}{g_i} = \frac{f_i}{g_i}$ , l'équation de transfert se réécrit :

$$\mu \frac{dI_\nu}{d\tau_V} = [\xi_\nu + E_{ij} \zeta \phi_\nu (x_j - x_i)] I_\nu - D_{ij} x_i \zeta \phi_\nu - \xi_\nu B_\nu \quad (\text{III.3})$$

Grace à ces changements de variables, on voit que l'équation de transfert dépend *explicitement* des populations. D'autre part, la variable spatiale est indépendante de la

fréquence de transition considérée. On voit de plus que la profondeur optique totale est :

$$\tau_v^{\text{Tot}}(\tau_V) = \int_0^{\tau_V} \chi_v^{\text{Cont}} + \chi_v^{\text{Raie}} dt = \int_0^{\tau_V} (\xi_v(t) + E_{ij}\zeta(t)\phi_v(t)[x_j(t) - x_i(t)]) dt \quad (\text{III.4})$$

### III.1.2 Formulation analytique de $\bar{\mathcal{J}}_{ij}(\tau_V)$

Comme nous l'avons indiqué en introduction de ce chapitre, nous allons chercher à résoudre l'équilibre statistique et le transfert en une seule étape. En ce qui concerne le transfert, nous allons utiliser la solution formelle de l'équation de transfert pour déterminer une forme analytique de  $\bar{\mathcal{J}}_{ij}(\tau_V)$ . Ainsi nous pourrions former un système d'équations semblable à la forme classique de l'équilibre statistique, mais dont le terme radiatif aura une dépendance explicite avec les populations dans le milieu.

Pour déterminer  $\bar{\mathcal{J}}_{ij}(\tau_V)$ , nous allons procéder de la même manière qu'au paragraphe II.1.4, c'est à dire déterminer la fonction de Green  $\mathcal{G}_{\mu\nu}$  de l'équation (III.3), puis l'intégrer sur les angles solides, et sur un profil de raie.

Ainsi on a :

$$I_\nu(\tau_V, \mu) = \int_{\tau_V^{\text{Min}}}^{\tau_V^{\text{Max}}} [D_{ij}x_i(t)\zeta(t)\phi_\nu(t) + \xi_\nu(t)B_\nu(t)] \mathcal{G}_{\mu\nu}(\tau_V; t) dt \quad (\text{III.5})$$

En faisant l'hypothèse que  $D_{ij}x_i\zeta\phi_\nu$  et  $\xi_\nu B_\nu$  sont indépendant de  $\mu$  (fonction de phase isotrope), que le terme continu  $\xi_\nu B_\nu$  ne varie pas sur la largeur d'une raie, et en séparant les contributions des raies et du continu, sachant que :

$$\bar{\mathcal{J}}_{ij}(\tau_V) = \frac{1}{2} \int_0^\infty \phi_\nu(\tau_V) \int_{-1}^{+1} I_\nu(\tau_V, \mu) d\mu d\nu \quad (\text{III.6})$$

le champs moyen vu par la transition  $i \rightarrow j$  est :

$$\begin{aligned} \bar{\mathcal{J}}_{ij}(\tau_V) = & \int_{\tau_V^{\text{Min}}}^{\tau_V^{\text{Max}}} \xi_{\nu_{ij}}(t) B_{\nu_{ij}}(t) \left[ \frac{1}{2} \int_0^\infty \phi_\nu(\tau_V) \left[ \int_{-1}^{+1} \mathcal{G}_{\mu\nu}(\tau_V; t) d\mu \right] d\nu \right] dt \\ & + D_{ij} \int_{\tau_V^{\text{Min}}}^{\tau_V^{\text{Max}}} x_i(t) \zeta(t) \left[ \frac{1}{2} \int_0^\infty \phi_\nu(\tau_V) \phi_\nu(t) \left[ \int_{-1}^{+1} \mathcal{G}_{\mu\nu}(\tau_V; t) d\mu \right] d\nu \right] dt \end{aligned} \quad (\text{III.7})$$



Après détermination de la fonction de Green de l'équation (III.3), (que l'on peut déterminer à l'aide du logiciel Mathematica) on obtient  $\bar{\mathcal{J}}_{ij}(\tau_V)$  :

$$\bar{\mathcal{J}}_{ij}(\tau_V) = \bar{\mathcal{J}}_{ij}^{\text{Ext}}(\tau_V) + \bar{\mathcal{J}}_{ij}^{\text{Cont}}(\tau_V) + \bar{\mathcal{J}}_{ij}^{\text{Raic}}(\tau_V) \quad (\text{III.8})$$

où  $\bar{\mathcal{J}}_{ij}^{\text{Ext}}(\tau_V)$  est l'expression issue des conditions aux limites du champ ( $I_\nu(\tau_V^{\text{Max}}, \mu) = I_+^{\text{Ext}}$ , et  $I_\nu(0, \mu) = I_-^{\text{Ext}}$ ). Nous le négligerons par la suite car le rayonnement continu des couches les plus profondes se substituera à ce terme, et nous ne considérerons pas de source externe. Pour ce qui est des expressions des différents champs, elles sont semblables à l'équation de Schwarzschild-Milne, mais avec une dépendance explicite en  $x_i$  et  $x_j$ .

$$\bar{\mathcal{J}}_{ij}^{\text{Ext}}[x_i, x_j](\tau_V) = I_-^{\text{Ext}} \beta_-[x_i, x_j](\tau_V) + I_+^{\text{Ext}} \beta_+[x_i, x_j](\tau_V) \quad (\text{III.9a})$$

$$\bar{\mathcal{J}}_{ij}^{\text{Cont}}[x_i, x_j](\tau_V) = \int_{\tau_V^{\text{Min}}}^{\tau_V^{\text{Max}}} \xi_{\nu_{ij}}(t) B_{\nu_{ij}}(t) L_1[x_i, x_j](t, \tau_V) dt \quad (\text{III.9b})$$

$$\bar{\mathcal{J}}_{ij}^{\text{Raic}}[x_i, x_j](\tau_V) = D_{ij} \int_{\tau_V^{\text{Min}}}^{\tau_V^{\text{Max}}} x_i(t) \zeta(t) K_1[x_i, x_j](t, \tau_V) dt \quad (\text{III.9c})$$

la notation  $f[x] \not\equiv f(x)$  signifie que  $f$  est une fonctionnelle de  $x$  et non pas une fonction de  $x$ . En effet  $x$  n'est pas un « nombre » mais une fonction  $x(\tau_V)$  qui appartient à un espace de Banach. Nous reviendrons sur ce point important par la suite.

Les probabilités d'échappement  $\beta_-$  et  $\beta_+$  ainsi que les *kernels*  $L_1$  et  $K_1$  ont pour expressions :

$$K_1[x_i, x_j](t, \tau_V) = \frac{1}{2} \int_0^{+\infty} \phi_\nu(\tau_V) \phi_\nu(t) E_1 \left| \tau_\nu^{\text{Tot}}[x_i, x_j](t) - \tau_\nu^{\text{Tot}}[x_i, x_j](\tau_V) \right| d\nu \quad (\text{III.10a})$$

$$L_1[x_i, x_j](t, \tau_V) = \frac{1}{2} \int_0^{+\infty} \phi_\nu(\tau_V) E_1 \left| \tau_\nu^{\text{Tot}}[x_i, x_j](t) - \tau_\nu^{\text{Tot}}[x_i, x_j](\tau_V) \right| d\nu \quad (\text{III.10b})$$

$$\beta_-[x_i, x_j](\tau_V) = \frac{1}{2} \int_0^{+\infty} \phi_\nu E_2(\tau_\nu^{\text{Tot}}[x_i, x_j](\tau_V)) d\nu \quad (\text{III.10c})$$

$$\beta_+[x_i, x_j](\tau_V) = \frac{1}{2} \int_0^{+\infty} \phi_\nu E_2(\tau_\nu^{\text{Tot}}[x_i, x_j](\tau_V^{\text{Max}}) - \tau_\nu^{\text{Tot}}[x_i, x_j](\tau_V)) d\nu \quad (\text{III.10d})$$

Notons par ailleurs que cette méthode est généralisable à différentes géométries. En effet, en partant de l'équation en sphérique (II.31) on peut tout aussi bien déterminer une fonction de Green. La seule différence sera que cette dernière ne dépendra pas d'une seule variable :  $\tau_V \rightarrow \mathcal{G}_{\mu\nu}(\tau_V; t)$ , mais de deux variables :  $(\tau_V, \mu) \rightarrow \mathcal{G}_\nu(\tau_V, \mu; t, m)$ . La seule différence concernera donc l'expression des *kernels*  $L_1$  et  $K_1$ .

### III.1.3 Contributions à $\bar{\mathcal{J}}$

L'observation des *kernels*  $L_1$  et  $K_1$  peut se révéler très instructive. En premier lieu on remarque qu'ils sont directement reliés à la probabilité d'échappement formelle. En effet :

$$\bar{\beta}(\tau_V) = 1 - \int_{\tau_V^{\text{Min}}}^{\tau_V^{\text{Max}}} K_1(t, \tau_V) dt \quad (\text{III.11})$$

La contribution du milieu entre  $t$  et  $t + dt$  au champ de la couche  $\tau_V$  est donc le terme source à  $t$ ,  $\xi_{\nu_{ij}}(t)B_{\nu_{ij}}(t)$  pour le continu et  $D_{ij}x_i(t)\zeta(t)$  pour les raies, pondéré par la densité de probabilité de contribution de  $t$  à  $\tau_V$  que représente le *kernel*.

On peut donc pour chaque transition déterminer la contribution de chaque couche au  $\bar{\mathcal{J}}$  en traçant l'intégrande des équations (III.9) (voir Fig. III.1).

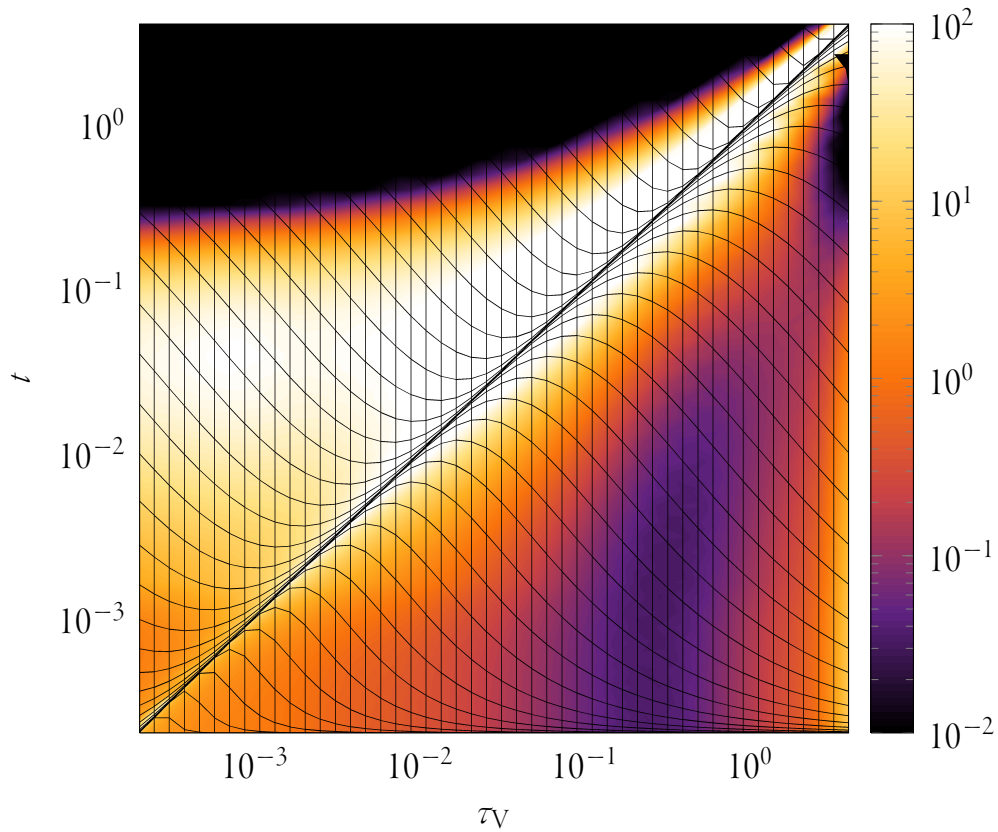
Plusieurs remarques importantes s'imposent au vu de la figure III.1. D'une part, on remarque que les intégrales des équations (III.9b) et (III.9c) sont singulières. En effet :

$$\lim_{t \rightarrow \tau_V} E_1 \left| \tau^{\text{Tot}}(t) - \tau^{\text{Tot}}(\tau_V) \right| = E_1(0^+) = \infty \Rightarrow \lim_{t \rightarrow \tau_V} \begin{cases} L_1(t, \tau_V) = \infty \\ K_1(t, \tau_V) = \infty \end{cases} \quad (\text{III.12})$$

on voit très bien cette singularité sur la figure III.1. La précision de l'intégration de cette dernière au voisinage de  $\tau_V$  est d'une importance capitale pour la détermination de  $\bar{\mathcal{J}}$  : il s'agit d'une contribution locale qui est très importante comme on le voit sur la figure III.1.  $\bar{\mathcal{J}}(\tau_V)$  est l'intégrale verticale de la carte de la figure III.1 sur la colonne  $\tau_V$ .

Nous préciserons par la suite la méthode mise en oeuvre pour intégrer précisément cette fonction.

Malgré le fait que les termes locaux semblent prédominants, on voit que les termes non locaux sont aussi importants. En effet toutes les couches contribuent à toutes les autres, reflétant la nature non-locale du transfert, à l'exception des couches très profondes trop opaques pour que les photons émis contribuent aux couches externes. Cependant, pour certaines transitions, le continu peut dominer dans les couches profondes là où  $\text{H}_2\text{O}$  est peu présent.



**FIGURE III.1** – Carte de l'intégrande de  $\bar{\mathcal{J}}_{ij}^{Cont} + \bar{\mathcal{J}}_{ij}^{Raie}$ , on y voit la contribution de la couche  $t$  à la couche  $\tau_V$  pour la transition  $i = 149 \rightarrow j = 83$ .

## III.2 Équilibre statistique

Le calcul de  $\bar{\mathcal{J}}$ , comme on le voit dans les équations (III.9), dépend des populations que l'on peut obtenir en résolvant l'équilibre statistique. Mais pour résoudre l'équilibre statistique on a besoin de  $\bar{\mathcal{J}}$ .

### III.2.1 Forme matricielle

Afin d'illustrer cette dépendance avec les populations, on réécrit l'équilibre statistique avec les nouvelles variables  $x_i$  définies précédemment :

$$\begin{aligned} & \sum_{j \neq i}^N x_i(\tau_V) \left( \tilde{A}_{ij} + \tilde{B}_{ij} \bar{\mathcal{J}}_{ij}[x_i, x_j](\tau_V) + \tilde{C}_{ij}(\tau_V) \right) \\ & - \sum_{j \neq i}^N x_j(\tau_V) \left( \tilde{A}_{ji} + \tilde{B}_{ji} \bar{\mathcal{J}}_{ji}[x_i, x_j](\tau_V) + \tilde{C}_{ji}(\tau_V) \right) = 0 \end{aligned} \quad (\text{III.13})$$

où  $\tilde{A}_{ij} = g_i A_{ij}$ ,  $\tilde{B}_{ij} = g_i B_{ij}$ ,  $\tilde{C}_{ij} = g_i C_{ij}$ .

On peut réécrire ce système d'équations (III.13) sous forme matricielle. En effet, si l'on définit le vecteur  $\mathbf{x}(\tau_V) = (x_1(\tau_V), x_2(\tau_V), \dots, x_i(\tau_V), \dots, x_N(\tau_V))$  contenant les populations de tous les niveaux, et en introduisant la matrice des taux de transitions :

$$\tilde{\mathbf{R}}[\mathbf{x}](\tau_V) = \tilde{\mathbf{A}} + \tilde{\mathbf{B}} \otimes \bar{\mathbf{J}}[\mathbf{x}](\tau_V) + \tilde{\mathbf{C}}(\tau_V) \quad (\text{III.14})$$

l'équilibre statistique devient :

$$\mathbf{M}[\mathbf{x}](\tau_V) \mathbf{x}(\tau_V) = \mathbf{0} \quad (\text{III.15})$$

où la matrice  $\mathbf{M}$  est, en introduisant  $\mathbf{I}$  la matrice identité et  $\mathbf{U}$  la matrice unité :

$$\mathbf{M}[\mathbf{x}](\tau_V) = \left( \tilde{\mathbf{R}}[\mathbf{x}](\tau_V) - \mathbf{I} \otimes \tilde{\mathbf{R}}(\tau_V) \mathbf{U} \right)^T \quad (\text{III.16})$$

La matrice  $\mathbf{M}$  a des coefficients qui sont des fonctionnelles de  $\mathbf{x}$ . En effet, à cause de l'intégrale des équations (III.9), il est nécessaire de connaître  $\mathbf{x}(\tau_V)$  pour tout  $\tau_V$ .

Pour coupler tout cela on va discrétiser le modèle d'atmosphère en  $P$  couches indicées par  $l$ . Ainsi  $\tau_V \rightarrow \tau_V^l, x_i \rightarrow x_i^l$  etc.

Après discrétisation,  $\bar{\mathbf{J}}$  et donc  $\mathbf{M}$  ne sont plus des fonctionnelles de  $\mathbf{x}$  mais des fonctions des éléments  $x_i^l$ . Cela implique que l'on peut réécrire les éléments de la matrice  $\tilde{\mathbf{R}}$  comme des fonctions des vecteurs  $\mathbf{x}^l$

$$\tilde{\mathbf{R}}^l(\mathbf{x}^1, \mathbf{x}^2, \dots, \mathbf{x}^P) = \tilde{\mathbf{A}} + \tilde{\mathbf{B}} \otimes \bar{\mathbf{J}}^l(\mathbf{x}^1, \mathbf{x}^2, \dots, \mathbf{x}^P) \tilde{\mathbf{C}}^l \quad (\text{III.17})$$

De la même manière, on peut réécrire l'équilibre statistique pour la couche  $l$  sous la forme :

$$\mathbf{M}^l(\mathbf{x}^1, \mathbf{x}^2, \dots, \mathbf{x}^P) \mathbf{x}^l = \mathbf{0} \quad (\text{III.18})$$

Encore une fois transparait le problème de la non localité du transfert dans la dépendance de la matrice  $\mathbf{M}^l$  avec les populations dans toutes les autres couches du modèle.

### III.2.2 Équilibre statistique multi-zones

Si l'on veut résoudre cette équation sans passer par la voie itérative, il est nécessaire de résoudre l'Eq. (III.18) dans chaque couche en une seule étape. Pour se faire, on construit un système tenant compte de toutes les couches :

$$\mathbf{\Gamma}(\mathbf{X}) = \begin{pmatrix} \mathbf{M}^1(\mathbf{X}) & 0 & 0 \\ 0 & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & \mathbf{M}^P(\mathbf{X}) \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \mathbf{x}^1 \\ \vdots \\ \mathbf{x}^P \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{0} \\ \vdots \\ \mathbf{0} \end{pmatrix} \quad (\text{III.19})$$

En introduisant le vecteur  $\mathbf{X} = (\mathbf{x}^1, \mathbf{x}^2, \dots, \mathbf{x}^P)$ , la matrice bloc-diagonale  $\mathbf{\Gamma}$ , l'équilibre statistique dans toutes les couches ainsi que le transfert peuvent être résolus par l'inversion de l'équation non-linéaire :

$$\mathbf{\Gamma}(\mathbf{X}) \cdot \mathbf{X} = \mathbf{F}(\mathbf{X}) = \mathbf{0} \quad (\text{III.20})$$

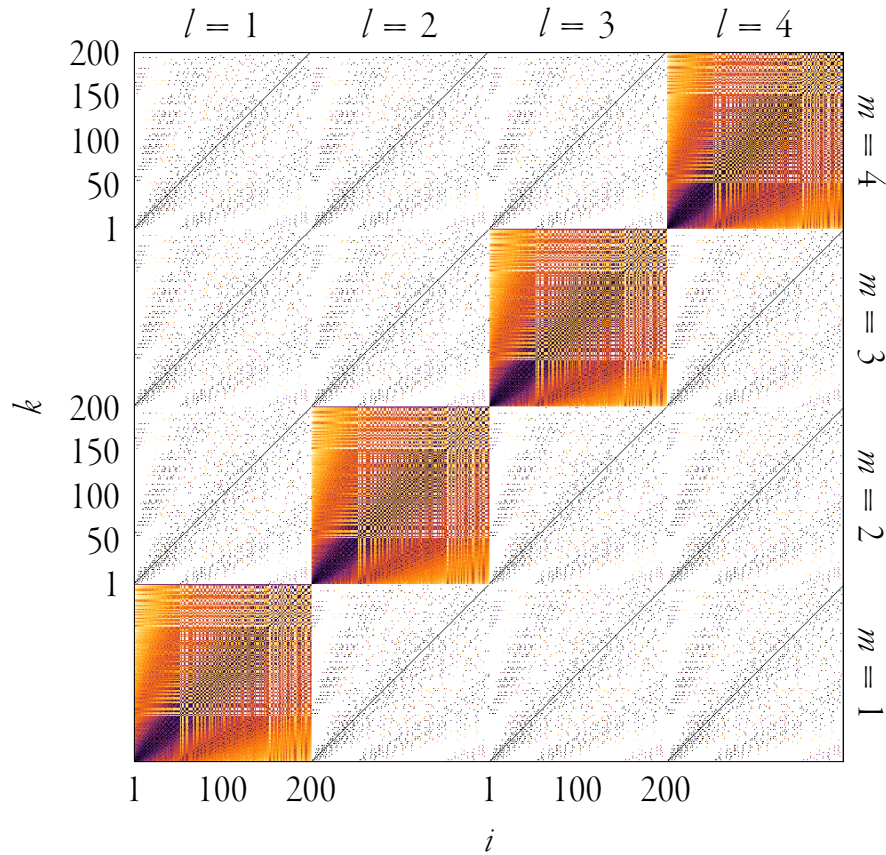
On obtient donc un système de  $N \times P$  équations intégrales de type Fredholm-Volterra couplées ayant un *kernel* singulier. Il n'est pas aisé de résoudre ce type de système, en particulier à cause de la dépendance du *kernel* avec les populations et de sa singularité. Cependant, si l'on considère juste la résolution de ce type de système non-linéaire on peut le résoudre numériquement par des méthodes de type Newton. Cela implique néanmoins la connaissance de la matrice Jacobienne. Mais des méthodes de résolution plus performantes peuvent être utilisées. Nous y reviendrons par la suite.

### III.3 Matrice Jacobienne

L'intérêt de la méthode décrite ci-dessus est en grande partie liée au fait que l'on peut déterminer une matrice Jacobienne analytique. En effet dans le cas contraire la détermination par différences finies de la matrice Jacobienne imposerait  $2(N \times P)^2$  calculs de la fonction  $\mathbf{F}(\mathbf{X})$ , qui nécessiteraient un temps de calcul important. Le temps de calcul deviendrait alors totalement prohibitif pour  $N$  et  $P$  grands.

Néanmoins, cela va poser un certain nombre de difficultés mathématiques. La matrice Jacobienne du système (III.20) se décompose en quatre sous-domaines qui reflètent les couplages physiques entre les états d'énergie et le rayonnement :

$$\frac{\partial F_i^l}{\partial x_k^m} = \begin{cases} \sum_{j \neq i}^N \frac{\partial \bar{\mathcal{J}}_{ij}^l}{\partial x_i^l} (x_i^l B_{ij} - x_j^l B_{ji}) + \sum_{j \neq i}^N (A_{ji} + B_{ji} \bar{\mathcal{J}}_{ji} + C_{ji}) & \text{si } k = i \text{ et } l = m \\ \frac{\partial \bar{\mathcal{J}}_{ik}^l}{\partial x_k^l} (x_k B_{ki} - x_i B_{ik}) - (A_{ki} + B_{ki} \bar{\mathcal{J}}_{ki} + C_{ki}) & \text{si } k \neq i \text{ et } l = m \\ \sum_{j \neq i}^N \frac{\partial \bar{\mathcal{J}}_{ij}^l}{\partial x_i^m} (x_i B_{ij} - x_j B_{ji}) & \text{si } k = i \text{ et } l \neq m \\ \frac{\partial \bar{\mathcal{J}}_{ik}^l}{\partial x_k^m} (x_k B_{ki} - x_i B_{ik}) & \text{si } k \neq i \text{ et } l \neq m \end{cases} \quad (\text{III.21})$$



**FIGURE III.2** – « Pattern » de la matrice Jacobienne calculée pour  $N = 200$  et  $P = 4$ . Les couplages locaux entre niveaux expliquent les blocs diagonaux pleins car chacun des états est couplé aux autres par les collisions. En revanche les couplages non locaux ne peuvent être que radiatifs, d'où les autres blocs creux.

- Le premier cas correspond à la diagonale de la matrice et la variation de la fonction (qui représente la différence entre ce qui arrive et ce qui part du niveau  $i$ ) si l'on modifie localement la population du niveau  $i$ .
- Le second cas est la variation de la fonction si l'on modifie la population d'un autre niveau dans une même couche. Il dépend donc de tous les couplages entre les niveaux, qui le sont tous entre eux à minima par les collisions. Les blocs diagonaux de la matrice ne contiennent donc aucun élément nul.
- En ce qui concerne les troisième et quatrième cas ( $l \neq m$ ) il s'agit de couplages

non locaux. La variation de la fonction si l'on modifie la population d'un niveau dans une autre couche ne peut avoir d'influence que si un photon « communique l'information » au niveau  $i$ . Ces termes reflètent donc les couplages radiatifs entre les couches. Les éléments de la matrice sont donc nuls si  $B_{ik} = 0$ . Les blocs non-diagonaux sont donc des blocs creux.

### III.3.1 Dérivées du champ moyen

Il reste à déterminer les terme  $\frac{\partial \bar{J}_{ik}'}{\partial x_k^m}$ , correspondant aux dérivées des équations (III.21) par rapport aux populations. Ici un problème majeur se pose. En effet, on ne peut pas dériver partiellement les équations (III.9) discrétisées. Si l'on discrétise l'intégrale, le terme local est infini, et la quadrature indéfinie. On doit donc dériver cette intégrale telle qu'elle est écrite dans les équations (III.9), et ce n'est qu'après l'obtention de la dérivée que l'on discrétisera. Mais comme nous l'avons dit plus haut, l'intégrale n'est pas une fonction de  $x$  mais une fonctionnelle de la fonction  $x$ . La variation de cette intégrale suite à la variation de  $x$  au point  $\tau_V' = t$  est ce que l'on appelle une dérivée fonctionnelle ou dérivée de Fréchet.

$$\frac{\delta F[x(\tau_V)]}{\delta x(t)} = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{F[x(\tau_V) + \varepsilon \delta(\tau_V - t)] - F[x(\tau_V)]}{\varepsilon} \quad (\text{III.22})$$

Le calcul de ces dérivées pour  $\bar{J}$  se révèle extrêmement fastidieux vu les dépendances en  $x_i$  et  $x_j$  de ces champs. Les difficultés résultent en particulier de la singularité des *kernels* et des bornes d'intégrations. De plus,  $\bar{J}$  n'est pas dérivable en  $\tau_V$  ce qui implique que les blocs diagonaux de la matrice ne sont pas encore accessibles.

On montre que les dérivées fonctionnelles de la composante liée aux raies du



champ sont :

$$\frac{\delta \bar{\mathcal{F}}_{ij}^{line} [x_i, x_j] (\tau_V)}{\delta x_j (s)} = D_{ij} \int_{\tau_{in}}^{\tau_{out}} \chi(t) x_i(t) \Theta (t, \tau_V, s) \tilde{K}_0 (t, \tau_V, s) dt \quad (\text{III.23a})$$

$$\frac{\delta \bar{\mathcal{F}}_{ij}^{line} [x_i, x_j] (\tau_V)}{\delta x_i (s)} = D_{ij} \chi (s) K_1 (s, \tau_V) - D_{ij} \int_{\tau_{in}}^{\tau_{out}} \chi(t) x_i(t) \Theta (t, \tau_V, s) \tilde{K}_0 (t, \tau_V, s) dt \quad (\text{III.23b})$$

et pour la composante continue :

$$\frac{\delta \bar{\mathcal{F}}_{ij}^{cont} [x_i, x_j] (\tau_V)}{\delta x_i (s)} = - \int_{\tau_{in}}^{\tau_{out}} \xi_{\nu_{ij}} (t) B_{\nu_{ij}} (t) \Theta (t, \tau_V, s) \tilde{L}_0 (t, \tau_V, s) dt \quad (\text{III.24a})$$

$$\frac{\delta \bar{\mathcal{F}}_{ij}^{cont} [x_i, x_j] (\tau_V)}{\delta x_j (s)} = \int_{\tau_{in}}^{\tau_{out}} \xi_{\nu_{ij}} (t) B_{\nu_{ij}} (t) \Theta (t, \tau_V, s) \tilde{L}_0 (t, \tau_V, s) dt \quad (\text{III.24b})$$

où la distribution  $\Theta$  est définie pour  $\{t, \tau_V, s\} \in [a, b]$  :

$$\Theta (t, \tau_V, s) = \begin{cases} \Pi_{a,s}(t) & \text{if } s < \tau_V \\ \Pi_{s,b}(t) & \text{if } s > \tau_V \end{cases} \quad (\text{III.25})$$

où  $\Pi_{a,b}$  désigne la fonction porte entre  $a$  et  $b$ , et les *kernels*  $\tilde{L}_0 (t, \tau_V, s)$  et  $\tilde{K}_0 (t, \tau_V, s)$  sont :

$$\tilde{L}_0 (t, \tau_V, s) = \frac{1}{2} \int_0^{+\infty} \phi_\nu (\tau_V) \phi_\nu (s) E_0 \left| \tau_\nu^{\text{Tot}} [x_i, x_j] (t) - \tau_\nu^{\text{Tot}} [x_i, x_j] (\tau_V) \right| d\nu \quad (\text{III.26a})$$

$$\tilde{K}_0 (t, \tau_V, s) = \frac{1}{2} \int_0^{+\infty} \phi_\nu (\tau_V) \phi_\nu (t) \phi_\nu (s) E_0 \left| \tau_\nu^{\text{Tot}} [x_i, x_j] (t) - \tau_\nu^{\text{Tot}} [x_i, x_j] (\tau_V) \right| d\nu \quad (\text{III.26b})$$

les équations (III.23a) et (III.23b) ne sont applicables que si  $s \neq \tau_V$  car les *kernels* ne sont pas dérivables en  $\tau_V$ . On remarque d'ailleurs que l'équation (III.23b) est indéterminée en  $s = \tau_V$ .

### III.3.2 Dérivées locales du champ moyen

Afin de déterminer les termes locaux de la matrice jacobienne, nous devons trouver une expression dérivable en tout point. Pour cela, nous allons faire une approximation sur  $\bar{\mathcal{J}}$  pour les termes locaux. Cette approximation n'aura aucune influence sur la précision du résultat. En effet il s'agit d'une approximation sur la matrice Jacobienne uniquement qui n'influe en rien le calcul de la fonction elle-même. En revanche, une mauvaise approximation pourrait nuire à la convergence de notre schéma de résolution.

Les termes diagonaux de la matrice Jacobienne correspondent à la variation de la fonction pour une modification locale des populations. Pour ce qui est des influences non-locales, les autres termes sont correctement calculés grâce aux équations (III.23a) et (III.23b).

On peut donc découpler les variations locale et globale, et ne pas se préoccuper dans l'approximation de  $\bar{\mathcal{J}}$  du domaine d'intégration loin de  $\tau_V$ .

Si l'on ne se concentre que sur les terme locaux ( $|t - \tau_V| \simeq 0$ ), on peut faire l'hypothèse que l'épaisseur optique totale varie linéairement avec  $\tau_V$  :  $\tau^{\text{Tot}}(t) - \tau^{\text{Tot}}(\tau_V) = \alpha_{ij}(t - \tau_V)$ . D'autre part on peut faire la même approximation qu'à la section II.3.1 en remarquant que le *kernel* décroît bien plus rapidement que le terme source et l'on peut donc utiliser le théorème de la valeur moyenne. Ainsi toute les fonctions  $f(t)$  prendront la valeur moyenne en  $\tau_V$  :  $f(t) \equiv f(\tau_V)$ .

Après découpage de l'intégrale et inversion des intégrales sur  $\mu$  et  $t$ , on a pour les raies :

$$\begin{aligned} \bar{\mathcal{J}}_{ij}^{\text{Raie}}(\tau_V) = & \frac{D_{ij}x_i}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \phi_v^2 \int_0^1 \int_0^{\tau_V} \exp\left(\frac{\alpha_{ij}}{\mu}(t - \tau_V)\right) dt \frac{d\mu}{\mu} dv \\ & + \frac{D_{ij}x_i}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \phi_v^2 \int_0^1 \int_{\tau_V}^{\tau_V^{\text{Max}}} \exp\left(-\frac{\alpha_{ij}}{\mu}(t - \tau_V)\right) dt \frac{d\mu}{\mu} dv \end{aligned} \quad (\text{III.27})$$

Après intégration sur  $t$  et en faisant l'hypothèse que  $\alpha_{ij}$  est dominé par la contribution

des raies ( $\alpha_{ij} = \xi_j(t) + E_{ij}(t)\phi_j(t)[x_j(t) - x_i(t)] \sim E_{ij}(t)\phi_j(t)[x_j(t) - x_i(t)]$ ) on obtient :

$$\bar{\mathcal{J}}_{ij}^{\text{Raie}}(\tau_V) = \frac{2h\nu_{ij}^3}{c^2} \frac{x_i(\tau_V)}{x_j(\tau_V) - x_i(\tau_V)} (1 - \beta_-(\tau_V) + I_+^{\text{Ext}}\beta_+(\tau_V)) \quad (\text{III.28})$$

De la même manière pour le continu, on a :

$$\bar{\mathcal{J}}_{ij}^{\text{Cont}}(\tau_V) = B_j(\tau_V)\beta(\tau_V) \quad (\text{III.29})$$

Avec une probabilité d'échappement approchée en plan parallèle on peut déterminer les dérivées partielles de la diagonale de la matrice jacobienne. Cette solution démontrée avec certaines hypothèses simplificatrices était facilement prévisible dans la mesure où on a dissocié les contributions locales et non locales.

### III.4 Propriétés de la solution

Avant de chercher à déterminer numériquement la solution de l'équation (III.20), nous allons nous intéresser aux propriétés de cette dernière en tentant de répondre à trois questions. Cette solution existe-t-elle ? Est-elle positive ? Que peut on dire de l'unicité de la solution ?

L'intérêt de répondre à ces questions est capital. En effet, plus que pour s'assurer de l'accès possible à une solution, la réponse à ces questions confirme que le problème est mathématiquement bien formulé. On peut à priori prédire la réponse à ces questions avec des arguments physiques. D'une part la solution existe car si tel n'est pas le cas cela signifie que le problème est mal posé. Et en ce qui concerne la positivité, on voit mal comment le nombre d'atomes dans un état excité peut être négatif. Ainsi tous les éléments de  $\mathbf{X}$  doivent être positifs ou nuls. Pour ce qui est de l'unicité on aurait tendance à supposer que dans les mêmes conditions physiques, les états sont peuplés de la même manière (nous discuterons ce point plus précisément).

Ces questions ont été posées pour le seul système d'équation de l'équilibre statistique local sans se préoccuper du couplage par le transfert dans deux articles (voir Damgaard et al., 1992 et Rybicki, 1997)

L'ambition de cette section est de voir dans quelle mesure les réponses apportées par les auteurs se généralisent au système d'équations (III.20).

### III.4.1 Unicité et positivité de l'équilibre statistique local

En suivant les travaux de Damgaard et al. (1992) et Rybicki (1997) nous allons montrer que les équations de l'équilibre statistique ayant un couplage linéaire entre elles (ce qui n'est pas le cas pour la formulation multi-zones de la section III.2.2 avec un couplage non-linéaire via  $\bar{f}$ ) possède une solution unique et positive. Comme nous l'avons dit précédemment, le système d'équations est dégénéré et sa résolution impose la substitution d'une d'entre elles par une équation de fermeture ou équation de normalisation que l'on appelle équation de conservation afin que la matrice associée ne soit plus singulière. Damgaard et al. (1992) montrent que si aucun des taux de transition est nul, alors un seul cofacteur non nul (ce qui se vérifie grâce à l'équation de normalisation) implique que la matrice est régulière et que la solution est unique et positive. D'un point de vue plus général, l'approche de Rybicki (1997) se place dans le cadre de la théorie de Markov (voir Freedman, 1983 et Grinstead & Snell, 2006). En effet, la solution de l'équilibre statistique est la configuration limite des états  $i$  reliés entre eux par des probabilités de transitions.

**Connectivité** La démonstration de la positivité est liée aux propriétés de connectivité de notre graphe ou l'ensemble des sommets  $S$  d'indice  $i$  sont reliés entre eux par des transitions ayant une probabilité  $R_{ij}$ . Avec ces notations l'équilibre statistique s'écrit :

$$\sum_i \sum_j n_i R_{ij} = \sum_i \sum_j n_j R_{ji} \quad (\text{III.30})$$

et l'équation de conservation

$$\sum_i n_i = n^{\text{Tot}} \quad (\text{III.31})$$

Afin de fixer les notations et les concepts, nous suivrons les préconisations de Freedman (1983, p. 16–17).

- Un état  $i$  est directement connecté à  $j$  si  $R_{ij} \neq 0$  et noté  $i \rightarrow j$ . Par convention nous ferons l'hypothèse que tout les sommets sont directement connectés à eux-mêmes ( $i \rightarrow i$ )
- La négation de la proposition ci-dessus ( $R_{ij} = 0$ ) est notée  $i \nrightarrow j$ .
- Un état  $i$  est lié à  $j$  et noté  $i \Rightarrow j$  s'il existe une chaîne de sommets directement connectés entre  $i$  et  $j$ :  $i \rightarrow k \rightarrow k' \rightarrow k'' \rightarrow j$ .
- La négation de la proposition précédente sera notée  $i \nRightarrow j$ .

De plus, on généralisera les définitions ci-dessus aux sous-ensembles de sommets vérifiant ces propriétés. Ainsi on notera  $A \rightarrow B$  ( $A \Rightarrow B$ ) s'il existe aux moins une paire d'états  $i \in A$  et  $j \in B$  tels que  $i \rightarrow j$  ( $i \Rightarrow j$ ).

D'autre part certaines propriétés doivent être énoncées :

**Lemme 1.** *Si les états sont subdivisés en deux sous-ensembles  $A$  et  $B$  on a :*

$$\begin{aligned} \sum_{i \in A} \sum_{j \in A} n_i R_{ij} + \sum_{i \in A} \sum_{j \in B} n_i R_{ij} &= \sum_{i \in A} \sum_{j \in A} n_j R_{ji} + \sum_{i \in A} \sum_{j \in B} n_j R_{ji} \\ \sum_{i \in A} \sum_{j \in B} n_i R_{ij} &= \sum_{i \in A} \sum_{j \in B} n_j R_{ji} \end{aligned}$$

Physiquement, cela se comprend par le fait que si l'on divise l'équilibre statistique en deux, le bilan pour chaque « sous-équilibre statistique » doit se compenser l'un l'autre.

De là, on montre les propriétés suivantes :

**Lemme 2.**  $A \rightarrow B \Leftrightarrow A \Rightarrow B$  de même que  $A \nrightarrow B \Leftrightarrow A \nRightarrow B$

*Preuve.* En effet, on voit immédiatement que  $A \rightarrow B$  implique que  $A \Rightarrow B$  grâce à la définition de  $\rightarrow$ .

On montre que  $A \Rightarrow B$  implique  $A \rightarrow B$ , car s'il existe une chaîne de sommets qui connectent les deux sous-ensembles, pour que cette chaîne existe, il y a au moins

deux sommets de chaque sous-ensemble connectés entre eux. Le même raisonnement est utilisé pour la seconde partie du théorème.  $\square$

**Polarisation** Grâce au lemme précédent on va maintenant montrer une propriété fondamentale de l'équilibre statistique.

**Lemme 3.** *On considère trois sous-ensembles  $P, N$  et  $Z$  qui rassemblent respectivement les états positifs, négatifs et nuls. Pour toute solution de l'équilibre statistique, les ensembles vérifient que  $P \nrightarrow N + Z$  et  $N \nrightarrow P + Z$*

*Preuve.* En effet, en appliquant le lemme 1 avec  $A = P$  et  $B = N + Z$ , on obtient :

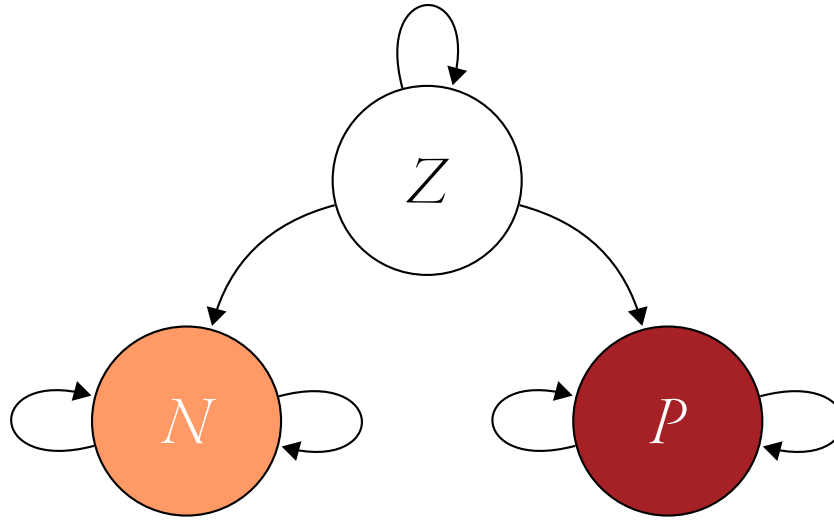
$$\sum_{i \in P} \sum_{j \in N+Z} n_i R_{ij} = \sum_{i \in P} \sum_{j \in N+Z} n_j R_{ji} \quad (\text{III.32})$$

Le terme de gauche est non-négatif alors que le terme de droite est non-positif. Cela implique que tous les taux de transition  $R_{ij} = 0$  si  $i \in P$  et  $j \in N + Z$  c'est à dire que  $P \nrightarrow N + Z$ , ce qui en vertu du lemme 2 est équivalent à  $P \nrightarrow N + Z$ . De la même manière, la seconde partie du lemme se démontre en prenant  $A = N$  et  $B = P + Z$ .  $\square$

**Théorème 1.** *Plus généralement on montre de la même manière que ci-dessus l'ensemble des propriétés suivantes :*

- *Les états positifs ne lient que des états positifs.*
- *Les états négatifs ne lient que des états négatifs.*
- *Les états positifs ne peuvent être liés qu'à des états non-négatifs.*
- *Les états négatifs ne peuvent être liés qu'à des états non-positifs.*
- *Les états nuls ne peuvent être liés qu'à des états nuls.*

**Irréductibilité** Dans la théorie de Markov  $i$  communique avec  $j$  ( $i \leftrightarrow j$ ) si  $i \Rightarrow j$  et  $j \Rightarrow i$ . Le système est dit irréductible si  $i \leftrightarrow j$  pour tous les états  $i \in S$  et  $j \in S$ , ce qui



**FIGURE III.3** – *Transitions possibles en vertu des propriétés mathématiques de connectivité de l'équilibre statistique entre les valeurs positive (P), négative (N) et nulle (Z) des populations sur les états.*

est le cas de l'équilibre statistique où tous les états sont connectés les un aux autres par les taux de collisions. Or dans ce cas on montre que :

**Théorème 2.** *Dans le cas d'un système irréductible avec une condition de normalisation, la solution est unique et positive.*

*Preuve.* En effet on sait grâce à l'équation de normalisation (III.31) qu'au moins un des états est positif. Or grâce au premier point du théorème 1, les états positifs ne lient que des états positifs. Mais si le système est irréductible, tous les états sont connectés à ce dernier et sont donc positifs.

Pour ce qui est de l'unicité on raisonne par contraposition. Si l'on considère deux solutions  $n_i^{(1)}$  et  $n_i^{(2)}$ , il existe une solution qui est la combinaison linéaire  $n_i$  de ces deux

solutions telle que

$$n_i = \alpha n_i^{(1)} + \beta n_i^{(2)} \quad (\text{III.33})$$

si  $\alpha + \beta = 1$  on peut réécrire l'équation ci-dessus :

$$n_i = n_i^{(1)} + \beta n_i^{(3)} \Rightarrow n_i^{(3)} = n_i^{(2)} - n_i^{(1)} \quad (\text{III.34})$$

Or l'équation (III.34) vérifie la condition de normalisation (III.31) :

$$\sum_i n_i^{(3)} = \sum_i n_i^{(2)} - \sum_i n_i^{(1)} = 0 \quad (\text{III.35})$$

cela signifie qu'il existe aux moins deux éléments de signe opposé dans la troisième solution et vient en contradiction avec le théorème 2  $\square$

La démonstration présentée dans cette section est un peu rapide et pourra être approfondie par la lecture des articles de Damgaard et al. (1992) et Rybicki (1997). Mais il est important de comprendre cette dernière pour savoir quels sont les critères qui sont les clés du raisonnement et comment ils se généralisent au système multi-zones défini plus haut.

La seule différence est que l'on doit résoudre  $P$  fois ce système mais avec des valeurs de  $R_{ij}$  fonction de  $\bar{\mathcal{J}}_{ij}$  et donc des populations des autres couches. Or  $\bar{\mathcal{J}}_{ij}$  est toujours positif, quel qu'en soit la dépendance. Les taux de collision rendent le système irréductible et l'on peut donc assurer que la solution de l'équation (III.20) est positive.

### III.4.2 Questions ouvertes

En revanche, pour l'unicité, le raisonnement impose de considérer un équilibre statistique dont les équations sont linéaires, ce qui n'est pas le cas dans le système multi-zones (III.20). La question fondamentale de l'unicité reste donc ouverte. Cependant une voie de recherche proposée lors de discussions avec P. Azerad (Institut de Modélisation Mathématique de Montpellier) est l'étude des points fixes de l'équation (III.20). En effet de nombreux théorèmes sur les points fixes comme le théorème des points fixes



de Banach permettant d'assurer l'unicité, ou le théorème de Lefschetz qui permet de « compter » le nombre de points fixes peuvent aider à répondre à la question de l'unicité.

D'autre part, un problème potentiellement important à envisager est lié à la résolution numérique de l'équilibre statistique et en particulier à la possible brisure numérique de l'irréductibilité. En effet, les règles de propension des taux de collisions (équivalent des règles de sélection pour les transitions radiatives) imposent que certains taux de collision, même si ils sont non-nuls, peuvent être extrêmement faibles et donc numériquement nuls.

La dernière interrogation est liée à la nature physique d'une solution multiple. En particulier si l'on ne considère les variations temporelles des populations en prenant en compte les chocs par exemples, le type d'équations non-linéaires et couplées tel que le système (III.20) peuvent tout à fait présenter des points fixes multiples et donc des solutions multiples (stables ou pas). C'est le cas de ce que l'on appelle les bifurcations de Hopf, dont un exemple fameux et semblable à notre problème est donné par des réactions de Belousov-Zhabotinsky. Dans tous les cas, ce type d'équation a une fâcheuse tendance à bifurquer vers le chaos. C'est presque toujours le cas dès qu'il y a des équations de Fredholm-Volterra couplées, le cas le plus connu étant les systèmes prédateurs-proies qui ont été à l'origine de l'introduction de ce type d'équations.

Mais plus que de simples interrogations mathématiques, ces questions peuvent se révéler très intéressantes, car ces phénomènes non-linéaires, voire chaotiques, peuvent engendrer des différences notables par rapport à une modélisation plus simple et donc des observables à même de sonder et de mieux comprendre les atmosphères d'étoiles froides.

# IMPLÉMENTATION NUMÉRIQUE

« *Hello World* »

**MORAD**

Extrait de «`~port-lambert:~/Users/lambert/MOrad/$`» (2009)

CHAPITRE IV : IMPLÉMENTATION NUMÉRIQUE . . . . .	97
<b>IV.1 MORad . . . . .</b>	<b>100</b>
<i>IV.1.1 Modèle d'atmosphère . . . . .</i>	<i>100</i>
<i>IV.1.2 Données moléculaires . . . . .</i>	<i>100</i>
<b>IV.2 Parallélisation . . . . .</b>	<b>101</b>
<i>IV.2.1 Scalabilité . . . . .</i>	<i>102</i>
<i>IV.2.2 Implémentation . . . . .</i>	<i>104</i>
<b>IV.3 Intégration numérique . . . . .</b>	<b>108</b>
<i>IV.3.1 Principe de la méthode des périodisations . . . . .</i>	<i>108</i>
<i>IV.3.2 « Split » de l'intégrale . . . . .</i>	<i>111</i>
<i>IV.3.3 Profil de raie . . . . .</i>	<i>114</i>
<i>IV.3.4 Résultats . . . . .</i>	<i>114</i>



La méthode décrite ci-dessus ne permet pas de déterminer une solution analytique du transfert. L'ambition de ce travail de thèse est de pouvoir résoudre le transfert en considérant des molécules telles que l'eau ayant un très grand nombre de raies et donc des systèmes très larges. Il est donc évident que la résolution du système III.18 nécessite une résolution numérique.

L'implémentation numérique de la méthode décrite aux chapitre III vas poser trois types de difficultés que nous allons tenter de pallier.

La première de ces difficultés est liée à la forme intégrale du champs moyen  $\bar{\mathcal{J}}_{ij}(\tau_V)$  et en particulier à la nature singulière des *kernels*. Or il est extrêmement important de déterminer efficacement et précisément  $\bar{\mathcal{J}}_{ij}(\tau_V)$ , car il s'agit du seul terme impliquant l'équation de transfert et la précision de la solution dépend essentiellement de son calcul.

D'autre part, comme nous l'avons déjà dit, le système a une dimension  $N \times P$ . Cela implique que les matrices  $\mathbf{\Gamma}(\mathbf{X})$ , jacobienne  $\mathbf{J}(\mathbf{X})$  et toute autre matrice intermédiaire a un nombre  $(N \times P)^2$  d'éléments ce qui peut se révéler prohibitif si  $P$  et  $N$  sont grands. Si l'on considère un modèle à 56 couches et 411 niveaux de l'eau dont chaque élément est codé en double précision, cela représente pour une seule matrice un espace mémoire de  $411^2 \times 56^2 \times 8 \text{ octets} \simeq 4.2 \text{ Go}$ . Cela limite considérablement la capacité à traiter de gros systèmes. Le problème de la ressource mémoire est donc fondamentale. La solution à ce problème est l'utilisation de machines à mémoire distribuée et de la librairie MPI (Message Passing Interface).

Enfin le dernier point est lié à la vitesse de résolution qui dépend de la taille du système, de la méthode de résolution et de son implémentation et enfin de la stratégie de parallélisation et de son implémentation, « *scalability* » en anglais dont l'horrible terme français scalabilité est entré dans le jargon courant (on utilise aussi le terme d'accélération, mais ce dernier prête à confusion).

## IV.1 MOrad

Afin de pouvoir quantifier les effets hors ETL dans les étoiles froides évoluées, la méthode décrite précédemment a été implémentée dans un code numérique en **FORTRAN95** baptisé **MOrad** (Molecular Radiative transfer) et ayant pour but de déterminer les populations d'un grand nombre de niveaux dans un modèle d'atmosphère. Cette application, en vertu de la dimension du problème est parallélisée de telle sorte que la limitation de la taille du système ne dépende que des ressources numériques à notre disposition. La stratégie de parallélisation sera développée plus précisément par la suite.

Ainsi, l'application va utiliser un modèle d'atmosphère précédemment calculé par un autre code et calculer le transfert dans ce dernier. Il n'y a pas pour le moment de rétroaction du transfert hors ETL sur la structure du modèle lui-même.

### IV.1.1 Modèle d'atmosphère

Pour le moment **MOrad** est capable de lire seulement un type de modèle issu du code **MARCS** (voir Gustafsson et al., 2008) dont une grille de modèles pavant un large espace de paramètres ( $T_{\text{eff}}$ ,  $\log g$ ,  $Z$ ,  $M$ ,  $v_{\text{Turb}}$ ) pour différentes géométries (plan parallèle, sphérique), et différentes classes de composition chimique permet d'obtenir via une interface web un modèle stratifié en 56 couches de l'atmosphère d'une étoile (de  $\tau_R = 10^{-5}$  à  $\tau_R = 10^2$ ). Chaque couche est caractérisée par ses épaisseurs optique et géométrique, sa pression (gaz et électrons), sa température, ainsi que les pressions partielles de différentes espèces chimiques comme  $\text{HI}$ ,  $\text{H}^-$ ,  $\text{H}_2$ ,  $\text{H}_2^+$  et des molécules comme  $\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{CO}$ ,  $\text{TiO}$ ...

### IV.1.2 Données moléculaires

D'autre part **MOrad** va lire les données moléculaires nécessaires à la résolution de l'équilibre statistique comme  $g_i$ ,  $E_i$ ,  $A_{ij}$ ,  $B_{ij}$ ,  $\nu_{ij}$  calculées par Barber et al. (2006) et les taux

de collision  $C_{ij}$  de Faure & Josselin (2008) qui seront interpolés à la température de la couche  $l$  considérée, grâce à une méthode de Stiefel (voir Stiefel, 1959), permettant d'obtenir une interpolation par polynôme de Tchebycheff de grande qualité et limitant les phénomènes de Runge. Nous considérons actuellement 822 niveaux (411 pour  $\text{H}_2\text{O}$ -ortho et 411 pour  $\text{H}_2\text{O}$ -para) soit 15194 transitions radiatives et 337020 transitions collisionnelles.

## IV.2 Parallélisation

Le calcul parallèle n'est pas seulement le moyen utilisé en dernier recours pour traiter des problèmes dont la taille interdit l'exécution sur un seul processeur. Il est probablement l'avenir du calcul scientifique. La pérennité d'un code scientifique est certainement conditionné par le fait qu'il soit parallèle ou non.

Il est un fait que le raffinement physique et donc la complexité des calculs scientifiques ne cesse d'augmenter et implique des besoins en puissance de calcul de plus en plus importants. Cependant la puissance des processeurs se heurte à un plafond de verre et ce pour plusieurs raisons (en effet les processeurs ont une fréquence de  $\sim 3 - 4$  GHz depuis les années 2002-2004). La première raison est liée à la consommation électrique qui croît très vite avec la fréquence et devient très importante.

En effet, la puissance dissipée par effet Joule croît comme la fréquence au cube, ce qui pose des problèmes de consommation et de refroidissement. On peut aussi citer le *Memory Wall* lié au fait que l'écart entre puissances réelle et théorique des processeurs ne cesse de se creuser du fait que le temps d'accès à la mémoire et le surcoût d'accès (latence) diminue moins vite que la puissance de calcul des processeurs. Il en résulte que la loi de Moore, bien que toujours vérifiée, ne l'est que grâce à la multiplication des cœurs et non à l'augmentation de leur puissance. Il est donc fort probable que l'avenir du calcul scientifique soit le calcul distribué et non le calcul séquentiel s'exécutant sur

un hypothétique super-processeur.

D'autres pistes comme le calcul sur accélérateur (GPU, Graphics Processing Unit) pourrait constituer une solution alternative, mais les observateurs éclairés du calcul intensif ont de bonnes raisons de ne pas trop y croire (stratégie industrielle des constructeurs de carte graphique, portabilité **OpenCL/CUDA**, coûts des infrastructures ...).

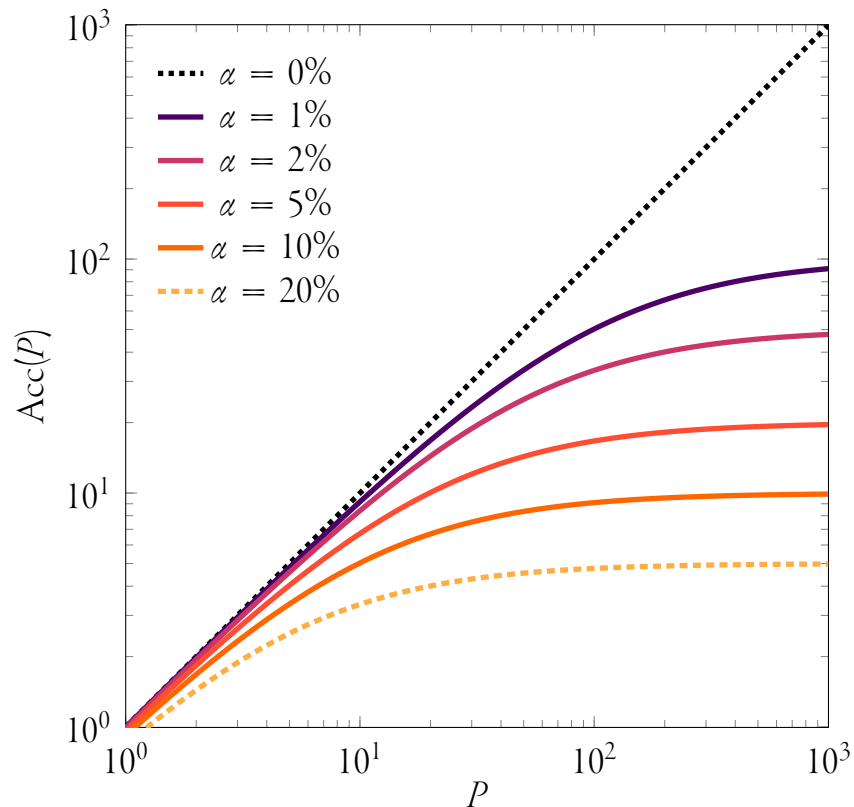
### IV.2.1 Scalabilité

**Loi d'Amdahl** La stratégie de parallélisation est un point important. En effet, elle permet deux choses : l'accélération du calcul mais aussi l'augmentation substantielle de la ressource mémoire. La librairie **MPI** permet de distribuer sur différents processus qui peuvent s'exécuter sur différents processeurs de différentes machines un calcul dont les valeurs des variables sont échangées via un réseau d'interconnexions. Cette distribution du calcul permet effectivement de multiplier l'espace mémoire d'autant que le nombre de nœuds utilisés. Pour ce qui est du temps d'exécution, cette loi d'échelle linéaire n'est pas forcément vérifiée mais suit la loi d'Amdahl.

$$\text{Acc}(P) = \frac{T_S}{T_{\parallel}} = \frac{1}{\alpha - \frac{1-\alpha}{P}} < \frac{1}{\alpha} \quad (\text{IV.1})$$

où  $\text{Acc}(P)$  est l'accélération d'un calcul s'exécutant sur  $P$  processeurs,  $T_S$  le temps d'exécution séquentielle,  $T_{\parallel}$  le temps d'exécution parallèle, et  $\alpha$  la partie non parallélisable de l'application.

Cette loi est très restrictive car s'il est vrai qu'avec une distribution totale de l'application sur  $P$  processeurs le temps de calcul est bien divisé par  $P$ , si seulement 20% par exemple du code n'est pas parallélisable, alors  $\text{Acc} < \frac{1}{20\%} = 5$ . L'accélération est donc bornée à une asymptote et augmenter le nombre de processeurs n'augmentera pas la vitesse d'exécution comme on le voit sur la figure IV.1.



**FIGURE IV.1** – Courbes de scalabilité pour différents pourcentage du code non-parallélisable. On remarque qu’une petite partie non parallélisable implique que l’accélération plafonne vers une asymptote d’équation  $Acc(P \rightarrow \infty) = 1/\alpha$ . Cela implique que la multiplication des processeurs n’a d’intérêt pour diminuer le temps de calcul que si l’application est très bien parallélisée.

**Types de communications** On voit donc qu’il est très important que la moindre opération qui prend du temps soit répartie sur chaque processeur pour que la parallélisation soit performante. Or certaines opérations ne le sont pas. Il faut savoir qu’il existe deux types de communications dans **MPI** : les communications point à point (« *peer to peer* ») qui consistent à envoyer un message d’un processus à un autre processus et qui sont dites non-bloquantes ; et il existe les communications dites globales qui envoient ou font recevoir un message à l’ensemble des processus et ces dernières sont dites bloquantes. En fait, une communication prend du temps (et c’est un temps non



parallélisable qui accroît  $\alpha$ ) à cause du voyage du message dans le réseau mais aussi du temps de latence de ce dernier. Pour les communications non-bloquantes les autres processus peuvent continuer à faire des calculs durant ce temps de communication. Ainsi, le temps perdu en communication est mis à profit. En revanche pour les communications globales qui sont bloquantes, tous les messages doivent être envoyés et reçus avant de pouvoir continuer le calcul et le temps perdu augmente la valeur de  $\alpha$ .

Pire, quand le nombre de processeurs augmente, le temps de communication total augmente lui aussi. En effet, un requête à la subroutine `MPI_ALLTOALL`, qui consiste pour chaque processeur à recueillir la valeur de tous les autres, implique un nombre de communications variant en  $P \ln P$ . Ainsi, si l'on abuse des communications globales,  $\alpha$  croît avec  $P$  et il se peut que l'accélération décroisse avec le nombre de processeurs.

Or le transfert est un problème global qui implique que l'état de chaque couche dépend de l'état de toutes les autres et qui nécessite donc des communications globales.

Traditionnellement les problèmes de transfert utilisent une voie de résolution itérative. Dans ce cas, on utilise la décomposition de domaine. Chaque processus détient un élément spatial du problème et durant les itérations qui font propager le champ, on « rafraichit » la valeur des éléments voisins par une communication point-à-point. On s'affranchit des problèmes des communications globales par la nature du schéma utilisé qui est itératif.

## IV.2.2 Implémentation

**Stratégie de parallélisation** Comme nous l'avons vu précédemment, les techniques itératives peuvent se révéler coûteuses en temps de calcul, voire non-convergentes pour des systèmes très larges. De plus, les méthodes d'inversion, à cause de la nature non-locale du transfert, impliquent a priori des communications globales potentiellement coûteuses en temps durant certains appels `MPI`. Quelle stratégie de

parallélisation utiliser, et quelle méthode de résolution choisir pour inverser le système III.18 ?

L'idée est de minimiser les communications globales, et donc de limiter les échanges de calculs intermédiaires susceptibles d'être communiqués à d'autres processus. Autrement dit, il vaut mieux dans certains cas dupliquer des éléments en mémoire et imposer que chacun des processus réalise un même calcul plutôt que d'effectuer de trop nombreuses communications globales qui sont bloquantes et qui nuiraient à la scalabilité du code. Néanmoins la non-localité du transfert implique au minimum une communication globale qui sera effectuée sur notre inconnue  $\mathbf{X}$ .

Il a été choisi de paralléliser le problème spatialement. Ainsi, chaque processus va effectuer les calculs d'au moins une couche  $l$ . Ainsi le processus  $l$  calculera  $x^l, \mathcal{J}_{ij}^l$ , interpolera les taux  $C_{ij}$  à la température  $T^l$  de la couche  $l$ , constituera la matrice  $\mathbf{\Gamma}$  en calculant  $\tilde{\mathbf{M}}^l$  et calculera une bande de  $(N \times P) \times P$  éléments de la matrice jacobienne. Le seul élément nécessaire pour déterminer toutes ces variables est que chaque processus détienne le vecteur  $\mathbf{X}$  que l'on obtient par la fonction globale `MPI_ALLGATHER` permettant à chaque processus d'envoyer  $x^l$  et de récupérer  $\mathbf{X}$ .

**Solveur** D'autre part, il est nécessaire de résoudre le système. Pour cela on utilise un solveur non-linéaire parallèle, dont l'efficacité et en particulier la scalabilité est démontrée. Le choix s'est porté sur **PETSc** (Portable, Extensible Toolkit for Scientific Computation) pour sa gratuité en particulier mais aussi pour son interfaçage avec **FORTRAN**. L'avantage de l'utilisation d'un solveur par rapport au codage d'une méthode de résolution est qu'il permet d'utiliser plusieurs méthodes différentes et donc de les tester, et d'utiliser d'autres fonctions comme le préconditionnement algébrique du système par exemple.

De plus l'utilisation de ce solveur apporte une plus-value dans la gestion de la

mémoire. En effet les matrices ne sont pas des tableaux **FORTTRAN** mais des objets. Les attributs que l'on peut leur donner sont très intéressants. En effet, pour ce qui est des matrices creuses telles que la matrice jacobienne, on peut déclarer le nombre d'éléments nuls dans les blocks de cette dernière et donc économiser de la mémoire. D'autre part, les algorithmes d'inversion et de communications implémentés utilisent ces métadonnées pour améliorer l'efficacité des méthodes utilisées.

**Méthode de résolution numérique** Quelle méthode numérique utiliser pour résoudre le système III.18 ? Il est évident que la résolution d'un tel système se fait par voie itérative, mais des itérations très différentes des méthodes ALI. Il ne s'agit pas d'un problème itératif. Toute la physique du milieu est contenue dans ce système : l'équilibre statistique et le transfert. On ne modifie pas l'état du système à chaque itération mais on inverse directement un système d'équations avec une méthode itérative. Les choix de méthodes sont nombreux. On peut citer la méthode de Newton-Raphson ayant un schéma du type :

$$\mathbf{J} \cdot \delta \mathbf{x} = -\mathbf{F} \quad (\text{IV.2})$$

que l'on inverse par une méthode classique (LU par exemple) afin de déterminer  $\delta \mathbf{x}$ , puis on rafraichit l'inconnue :

$$\mathbf{x}_k = \mathbf{x}_{k-1} + \delta \mathbf{x} \quad (\text{IV.3})$$

On peut aussi accélérer les calculs en utilisant par exemple la méthode de Broyden afin de ne pas recalculer la matrice jacobienne à chaque itération et dont l'inversion de la matrice par la méthode QR accélère les étapes de calcul.

Le choix s'est porté sur les méthodes des sous-espace de Krylov et en particulier la méthode GMRES (Generalized Minimal Residual Method), (voir Saad & Schultz, 1986) qui cherche à minimiser le résidu  $|\mathbf{x}_k - \mathbf{x}|$ . L'intérêt de cette méthode réside dans le fait qu'elle est particulièrement adaptée pour des systèmes creux et larges, ce

qui est le cas de notre système. En effet la complexité d'une itération est  $N^2$ , mais tend vers  $N$  si la matrice est creuse. Néanmoins la complexité asymptotique n'est pas simple à déterminer car il faut ajouter à cela un terme en  $Nk$  lors de la  $k^{\text{ième}}$  itération. Mais si  $k$  devient grand on peut redémarrer l'algorithme avec l'itération précédente comme solution initiale. Rappelons par ailleurs que cette méthode est parallélisée dans **PETSc**, ce qui fait que l'on peut considérer que la méthode varie en  $N \times P/N$  si le nombre de couches et de processeurs est  $N$  et que l'on traite  $P$  niveaux. En ce qui concerne le nombre d'itérations avant la convergence, les résultats présentés au chapitre V avec  $N = 50$  et  $P = 400$  ont nécessité seulement trois itérations avant de déterminer la racine de  $\mathbf{F}(\mathbf{X})$  à la précision machine.

**Solution initiale** Le nombre d'itérations dépend du choix de la solution initiale (ETL, ou toutes les molécules sur le 1<sup>er</sup> niveau par exemple), du préconditionneur utilisé (jacobi, bjacobi, sor, eisenstat, icc, ilu, asm, ksp, lu, cholesky, etc...) dont on doit trouver un équilibre entre le nombre d'itérations et le temps du préconditionnage.

Pour ce qui est du choix de la solution initiale, il semble que prendre toutes les molécules sur le niveau fondamental est efficace. En effet, cela simplifie énormément la matrice jacobienne et semble cependant être dans le rayon de convergence. Si tel n'était pas le cas on peut cependant forcer la convergence avec une solution à l'ETL.

Si on multiplie les taux de collision par un facteur arbitrairement grand, la solution de ce système est proche de l'ETL et donc dans le rayon de convergence. Une fois cette dernière obtenue, on diminue peu à peu ce facteur multiplicatif afin de le faire tendre vers 1 et, de proche en proche tout en déplaçant le rayon de convergence, obtenir la solution du problème initial.

**Hybridation** Ajoutons par ailleurs qu'une des solutions non implémentées dans **MOrad** pour le moment, mais en bonne voie de l'être et permettant d'obtenir de meilleurs résultats et en particulier de pouvoir augmenter le nombre de coeurs sur

lesquels l'application s'exécute ( $N_{\text{Proc}} \leq P$ ) est l'hybridation du code, c'est à dire l'utilisation couplée de **MPI** et **OpenMP**. En effet, le calcul de  $\bar{\mathcal{J}}_{ij}$  s'effectue dans une boucle parallèle sur  $i$  et  $j$  utilisant des variables propres à la couche et stockées dans la mémoire indépendamment de la transition considérée. Ainsi cette boucle peut être distribuée sur les différents coeurs d'un même nœud de calcul partageant le même espace mémoire et exécuter l'application sur ( $N_{\text{Proc}} = P \times N_{\text{Coeur/Noeud}} \times N_{\text{Noeud}}$ ).

## IV.3 Intégration numérique

Comme nous l'avons mentionné plus haut, la détermination de  $\bar{\mathcal{J}}_{ij}(\tau_V)$  nécessite l'intégration de fonctions singulières, et il est très important que cette dernière soit effectuée avec précision.

De nombreuses méthodes d'intégration existent. Pour ce qui est de l'intégration de fonctions singulières, la plupart des schémas efficaces sont itératifs. Néanmoins certaines méthodes de quadrature peuvent se révéler extrêmement efficaces pour des fonctions singulières. L'une d'elles est la méthode des périodisations (voir Helluy et al., 1998), dont nous allons exposer le principe et la manière dont elle sera implémentée pour évaluer  $\bar{\mathcal{J}}_{ij}(\tau_V)$ .

### IV.3.1 Principe de la méthode des périodisations

La méthode des périodisations est une quadrature d'ordre élevé basée sur les propriétés d'un polynôme particulier. Elle consiste en un changement de variable bien choisi qui permet d'augmenter sensiblement l'ordre de la méthode des rectangles.

La méthode des rectangles est une méthode d'ordre 1. En effet l'erreur de quadrature sur l'intégrale de la fonction  $f$  divisée en  $N$  intervalles de même largeur varie comme :

$$E_f(N) \sim \frac{1}{N} \quad (\text{IV.4})$$

Néanmoins, certaines fonctions  $f$  de classe  $C^{2k}$  dont les dérivées impaires vérifient :

$$f^{(2i-1)}(0) = f^{(2i-1)}(1) \text{ pour } 1 \leq i \leq k-1 \quad (\text{IV.5})$$

augmentent l'ordre de la méthode des rectangles puisque l'on peut montrer que l'erreur de quadrature varie comme :

$$|E_f(n)| \leq 2 \left( \sum_{l=1}^{\infty} \frac{1}{(2\pi l)^{2k}} \right) \sup_{x \in [0,1]} \left| f^{(2k)}(x) \right| \frac{1}{N^{2k}} \quad (\text{IV.6})$$

Ainsi, la méthode des rectangles appliquée à une fonction vérifiant ces propriétés est d'ordre  $2k$ . Cependant il n'y a aucune raison que l'intégrande singulier dans l'expression de  $\bar{\mathcal{J}}_{ij}(\tau_V)$  vérifie les conditions (IV.5).

Néanmoins il nous est possible d'effectuer un changement de variable  $x \rightarrow P(x)$  tel que :

$$\int_0^1 f(u) du = \int_0^1 f(P(u)) P'(u) du = \int_0^1 g(u) du \quad (\text{IV.7})$$

qui donne à l'intégrand  $g(u)$  les propriétés évoquées dans l'équation (IV.5).

Reste à déterminer le polynôme  $P(x)$ . En vertu des conditions de l'équation (IV.5), la fonction  $g(u)$  doit vérifier :

$$g^{(i)}(0) = g^{(i)}(1) = 0 \text{ pour } 0 \leq i \leq 2k-3 \quad (\text{IV.8})$$

Pour cela, on introduit le seul polynôme de degré  $4k-3$  qui vérifie  $P(0) = 0$  et  $P(1) = 1$  et qui donne les propriétés attendues pour l'intégrand. Ce polynôme est :

$$P(x) = \frac{\int_0^x t^{2k-2} (1-t)^{2k-2} dt}{\int_0^1 t^{2k-2} (1-t)^{2k-2} dt} \quad (\text{IV.9})$$

que l'on peut réécrire d'une manière numériquement plus exploitable :

$$P(x) = \frac{\sum_{i=0}^{2k-2} \frac{(-1)^i}{i!} (2k-2-i)! (2k-1+i) x^{2k-1+i}}{\sum_{i=0}^{2k-2} \frac{(-1)^i}{i!} (2k-2-i)! (2k-1+i)} \quad (\text{IV.10})$$

D'un point de vue général, cette méthode d'ordre  $2k$  se généralise aux fonctions singulières sur un intervalle  $[0, 1]$  si la singularité est au bord de l'intervalle. On montre que l'erreur varie comme :

$$|E_f(N)| \leq G_k \sup_{x \in [0,1]} \sum_{i=0}^{2k} \left| f^{(i)}(x) \right| \frac{1}{N^{2k}} \sim \frac{C_k}{N^\gamma} \quad (\text{IV.11})$$

ce qui en fait une méthode d'ordre  $\gamma$  où  $\gamma = 2k > 1$  pour les fonction régulières ou singulières.

**TABLE IV.1** – *List of symbols*

$f(x)$	$k$	$C_k$	$\gamma$	$ E_f(N = 10) $	$ E_f(N = 20) $
$\exp(x)$	2	$1.857.10^0$	4.000	$0.184.10^{-3}$	$0.119.10^{-4}$
	3	$3.714.10^1$	6.000	$0.368.10^{-4}$	$0.580.10^{-6}$
	4	$1.110.10^3$	8.000	$0.105.10^{-4}$	$0.430.10^{-7}$
	5	$4.834.10^4$	9.996	$0.481.10^{-5}$	$0.458.10^{-8}$
	10	$3.613.10^{14}$	19.98	$0.627.10^{-3}$	$0.818.10^{-9}$
$1/x^\alpha$	2	$1.216.10^0$	2.010	$0.117.10^{-1}$	$0.290.10^{-2}$
	3	$8.539.10^{-1}$	3.333	$0.313.10^{-3}$	$0.354.10^{-4}$
	5	$3.957.10^1$	6.000	$0.249.10^{-4}$	$0.452.10^{-6}$
	10	$4.642.10^5$	12.40	$0.384.10^{-5}$	$0.136.10^{-9}$
$\ln(x)$	2	$3.222.10^0$	3.030	$0.302.10^{-2}$	$0.367.10^{-5}$
	3	$3.340.10^2$	5.050	$0.306.10^{-3}$	$0.934.10^{-5}$
	5	$3.049.10^4$	9.091	$0.142.10^{-4}$	$0.423.10^{-7}$
	10	$1.735.10^{14}$	19.05	$0.475.10^{-5}$	$0.919.10^{-11}$

**TABLE IV.2** – *Test de la méthode des périodisations sur des fonctions régulières et singulières pour différents degrés  $4k - 3$  du polynôme  $P$ , et pour  $N = 10$  et  $N = 20$*

Un test sur différentes fonctions (Table IV.2) et en particulier la fonction  $\ln(x)$ , qui présente une singularité logarithmique tout comme les *kernels* de  $\bar{\mathcal{J}}_{ij}(\tau_V)$ <sup>1</sup>, nous montre

1. En effet on voit dans le développement en série des kernels que :  $E_1(x) = -\gamma - \ln(x) - \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n x^n}{nn!}$

l'efficacité de la méthode avec  $N$  de l'ordre de 10 ou 20, ce qui fait de cette méthode une quadrature particulièrement bien adaptée à notre problème ayant un nombre de points de quadrature imposé par la discrétisation du modèle. On remarque, de plus, que lorsque  $k$  augmente la méthode tend bien vers une méthode d'ordre  $2k$  pour les fonctions singulières.

### IV.3.2 « *Split* » de l'intégrale

Cependant, l'intégrale que nous devons évaluer pour déterminer  $\bar{\mathcal{J}}_{ij}(\tau_V)$  présente une singularité en  $\tau_V$  et non au bord du domaine. Cela implique que nous devons couper l'intégrale et intégrer sur deux domaines  $[\tau_V^{\text{Min}}, \tau_V[$  et  $]\tau_V, \tau_V^{\text{Max}}]$ . Ainsi on a :

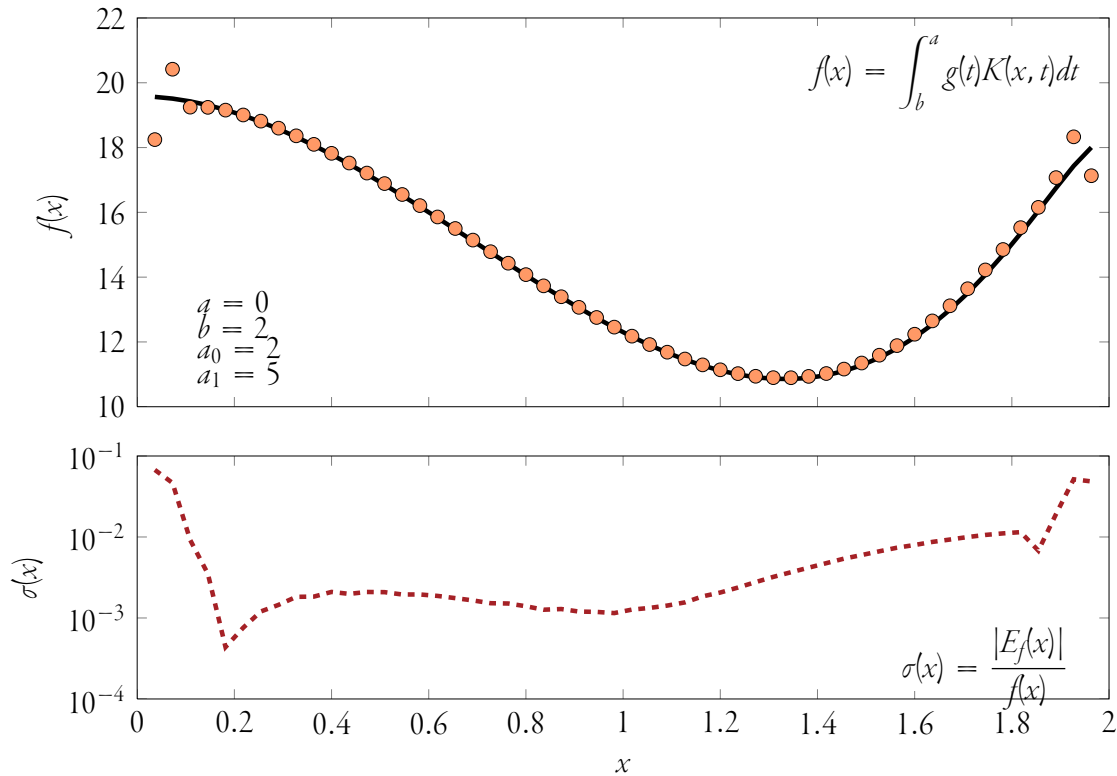
$$\begin{aligned}\bar{\mathcal{J}}_{ij}(\tau_V) &= \int_{\tau_V^{\text{Min}}}^{\tau_V} \xi_{\nu_{ij}}(t) B_{\nu_{ij}}(t) L_1(t, \tau_V) dt + \int_{\tau_V}^{\tau_V^{\text{Max}}} \xi_{\nu_{ij}}(t) B_{\nu_{ij}}(t) L_1(t, \tau_V) dt \\ &= \bar{\mathcal{J}}_{ij}^{\text{Inf}}(\tau_V) + \bar{\mathcal{J}}_{ij}^{\text{Sup}}(\tau_V)\end{aligned}\quad (\text{IV.12})$$

De plus la méthode impose que le domaine d'intégration soit  $[0, 1]$ , discrétisé de manière uniforme. Pour cela nous utiliserons une échelle  $\log(\tau_V)$  uniformément échantillonnée, puis un second changement de variable permettra de réécrire  $\bar{\mathcal{J}}_{ij}^{\text{Inf}}(\tau_V)$  et  $\bar{\mathcal{J}}_{ij}^{\text{Sup}}(\tau_V)$  comme des intégrales entre  $[0, 1]$  (en divisant par la largeur du domaine d'intégration).

Néanmoins, plus  $\tau_V$  sera proche des bords du domaine, plus le domaine d'intégration d'une des intégrales sera petit. Et comme on ne peut pas rééchantillonner l'intégrant sans modifier le nombre de processeurs utilisés pendant le calcul, il est nécessaire de vérifier que le découpage de l'intégrale ne génère pas une erreur trop importante.

On vérifiera cela en effectuant un test de la méthode avec une singularité logarithmique en un point  $x \in [a, b]$ , dont nous pouvons déterminer une solution analytique (Fig. IV.2).





**FIGURE IV.2** – « Benchmark » de la méthode des périodisations avec  $g(t) = a_1 t^2 + a_0$ ,  $K(x, t) = E_1(\tau(x) - \tau(t))$  et  $\tau(x) = \int_a^b 2tdt$  sur un domaine discrétisé en 56 points équidistants

On remarque qu'il y a effectivement des effets de bord, mais qui s'estompent très vite. On peut s'affranchir de cette erreur en considérant 4 mailles fantômes sur les bords du domaine. D'autre part, plus physiquement, au vu de la figure (III.1) on remarque que pour  $\tau_V \sim \tau_V^{\text{Max}}$ , le champ se propage très peu. Ainsi, même dans le cas où  $\bar{\mathcal{J}}_{ij}^{\text{Inf}} > \bar{\mathcal{J}}_{ij}^{\text{Sup}}$ , ce qui est une condition difficile à remplir au vu du ratio des largeurs d'intégration de chaque champ, l'erreur sur  $\bar{\mathcal{J}}_{ij}^{\text{Inf}}$  ne contribuera que très peu au spectre émergent. Inversement si  $\tau_V \sim \tau_V^{\text{Min}}$ , les couches externes contribuent a priori beaucoup moins que la somme des couches internes. Il est donc possible de négliger  $\bar{\mathcal{J}}_{ij}^{\text{Sup}}$  par rapport à  $\bar{\mathcal{J}}_{ij}^{\text{Inf}}$ .

**Résultat de l'intégration de  $\bar{\mathcal{J}}_{ij}$**  On peut dès lors intégrer grâce à cette méthode les équations (III.9) et déterminer  $\bar{\mathcal{J}}_{ij}$  à toutes profondeurs  $\tau_V$  du modèle pour chaque transition. Le résultat de l'intégration est présenté pour une transition sur la figure IV.3.

### IV.3.3 Profil de raie

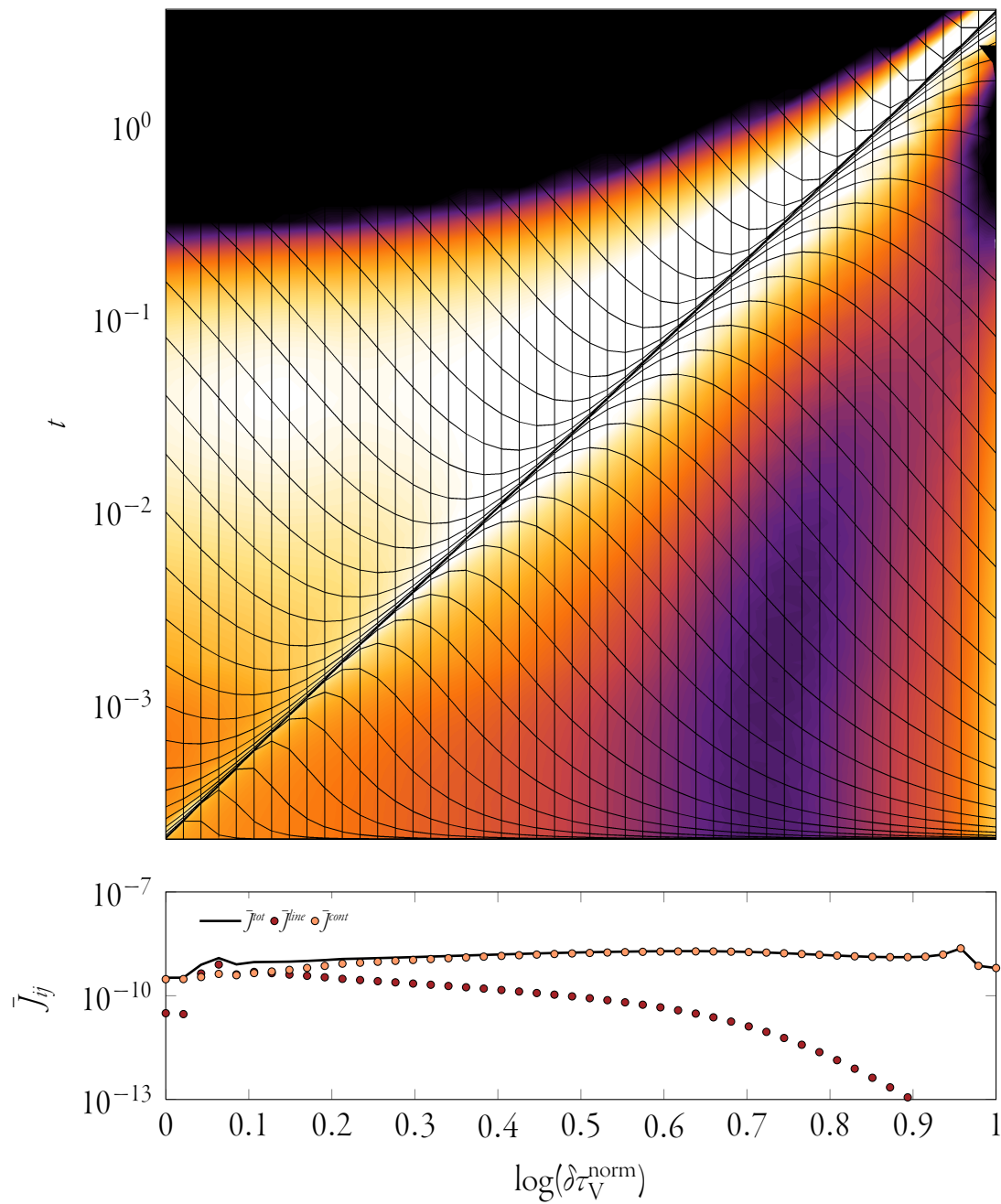
L'implémentation numérique de  $\phi_\nu$  et plus particulièrement la discrétisation des variables nécessaires au calcul des *kernels* pose un problème. En effet les *kernels* nécessitent une intégration sur les fréquences et sur  $\tau_V$ . Ainsi il est nécessaire qu'à chaque profondeur optique on utilise le même point en fréquence. Mais cela pose une difficulté. En effet, pour obtenir une intégration avec une bonne précision il est nécessaire de correctement échantillonner le profil de raie. Or ce profil a une largeur qui dépend de la température et donc de sa position dans le modèle, si bien qu'un bon échantillonnage de ce profil implique des points en fréquence plus ou moins espacés et donc non alignés. Pour remédier à ce problème, on effectue un changement de variable  $\nu \rightarrow x = \frac{\nu - \nu_{ij}}{\nu_{ij}}$  qui permet de correctement discrétiser le profil de raie indépendamment de la température. Ainsi en posant :

$$v_D = \sqrt{\frac{2k_B T}{m} + v_{\text{Turb}}^2} \quad (\text{IV.13})$$

on intègre sur les fréquences un profil

$$\tilde{\phi}_x^G(\tau_V) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \frac{c}{v_D} \exp \left[ - \left( x \frac{c}{v_D} \right)^2 \right] = \nu_{ij} \phi_\nu^G(\tau_V) \quad (\text{IV.14})$$

sur des points  $x$  identiques dans toutes les couches et échantillonnant correctement le profil de raie.



**FIGURE IV.3** – Contribution de la couche  $t$  à la couche  $\tau_V$  à  $\bar{J}_{ij}$  de la transition  $i = 149 \rightarrow j = 83$  (continu + raie). L'intégration numérique est réalisée grâce à la méthode des périodisations.

### IV.3.4 Résultats

Ainsi, pour chaque couche et pour chaque transition  $i \rightarrow j$ , en faisant l'hypothèse d'une distribution initiale des population  $x_i^0$ , on peut déterminer toutes les variables nécessaires au calcul de  $\bar{\mathcal{J}}_{ij}(\tau_V)$  ( $D_{ij}, x_i, \zeta, \xi_\nu, B_\nu, \phi_\nu$ ). Dès lors on peut constituer la matrice  $\mathbf{\Gamma}(\mathbf{X}_0)$  et donc le système III.18. On peut aussi déterminer les éléments nécessaires à la résolution de ce système comme la matrice jacobienne  $\mathbf{J}(\mathbf{X}_0)$ . On dispose donc d'une inconnue  $\mathbf{X}$ , d'une fonction  $\mathbf{F}(\mathbf{X})$  et de sa matrice jacobienne. Il est donc désormais possible de déterminer la valeur de  $\mathbf{X}$  via un solveur non linéaire et donc les populations de chaque niveau dans toutes les couches du modèle. On peut ainsi calculer la fonction source, et utiliser la solution formelle de l'équation de transfert pour obtenir le flux émergent et donc le spectre, mais aussi la fonction de refroidissement, la pression de radiation, etc.

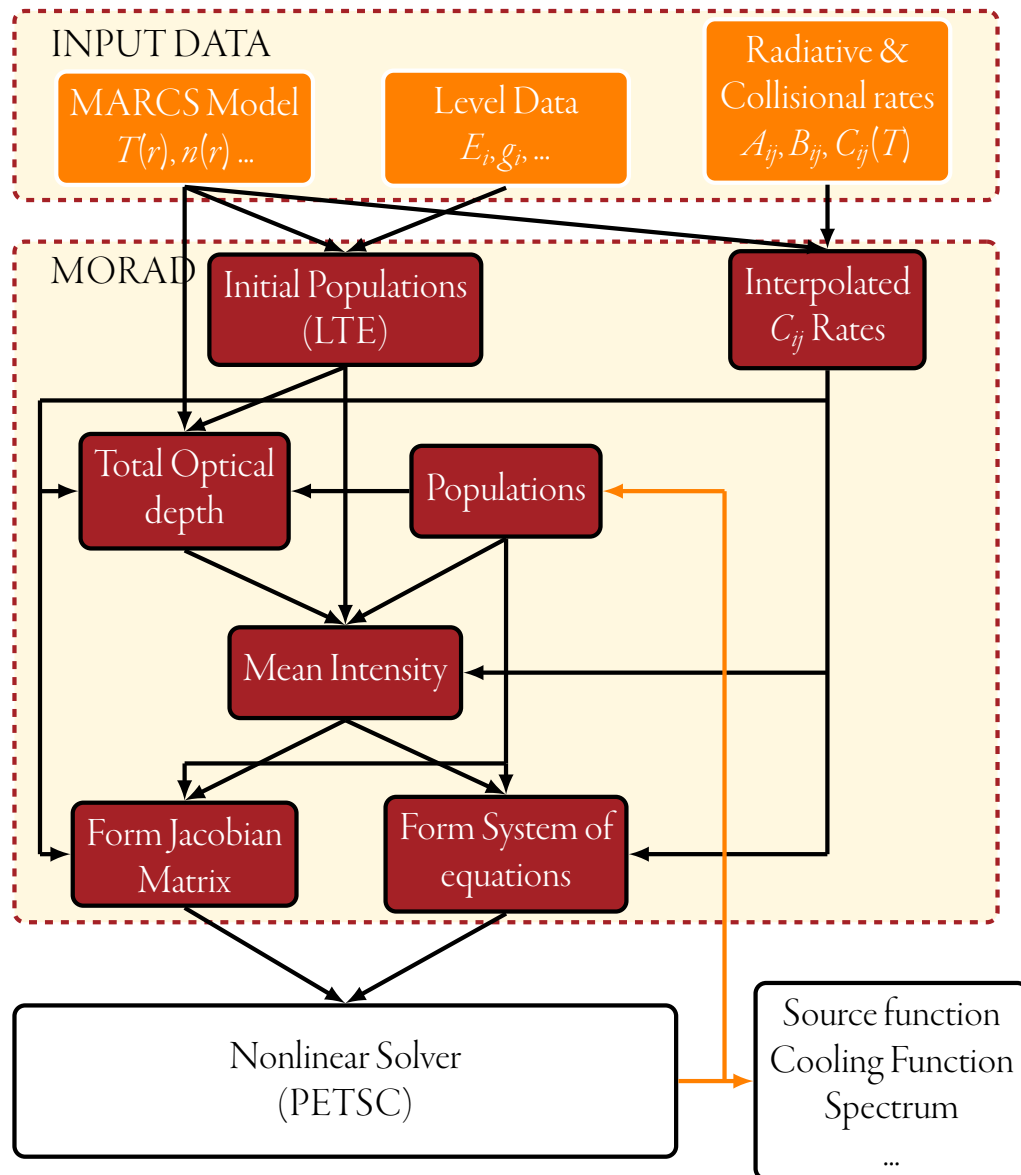


FIGURE IV.4 – Structure générique de MORAD

## Troisième partie

### Résultats



## RÉSULTATS

« L'observation recueille les faits ; la réflexion les combine ;  
l'expérience vérifie le résultat de la combinaison. »

DENIS DIDEROT

CHAPITRE V : RÉSULTATS	119
<b>V.1 Populations</b>	121
<i>V.1.1 Résultats</i>	121
<i>V.1.2 Interprétation</i>	122
<b>V.2 Spectre</b>	124
<i>V.2.1 Spectre synthétique : ETL vs hors ETL</i>	124
<i>V.2.2 Effets systématiques</i>	128
<b>V.3 Fonction de refroidissement</b>	131
<i>V.3.1 Taux de refroidissement</i>	131
<i>V.3.2 Résultat</i>	131
<b>V.4 Pression de radiation</b>	132



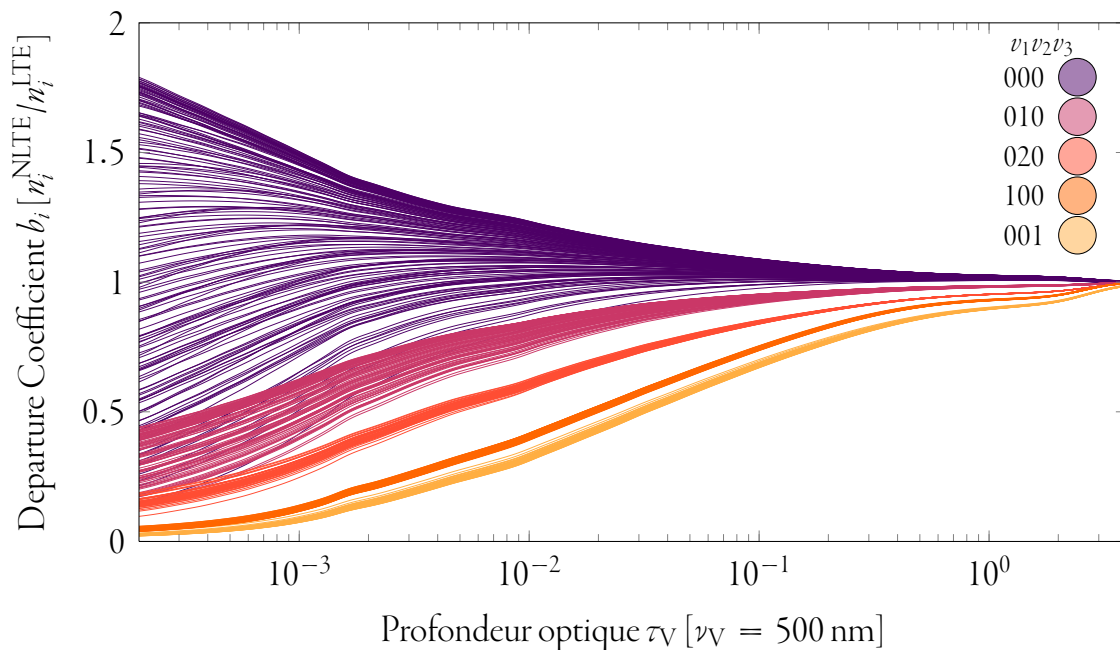


Les résultats obtenus à l'aide de MOrad l'ont été à l'aide des taux de collisions de Faure & Josselin (2008), radiatifs de Barber et al. (2006), ainsi que d'un modèle MARCS d'atmosphère de supergéante rouge de type  $\alpha$  Ori. Ces valeurs rapprochent ce modèle de l'atmosphère de  $\alpha$  Ori. Du fait de certaines lacunes en ingrédients physiques inclus dans MOrad lors de ce calcul, et de la seule géométrie plan parallèle implémentée alors et un traitement ETL du continu, il est plus raisonnable de comparer ces résultats à un calcul ETL, qu'à des observations pour quantifier les effets hors ETL dans un premier temps. Néanmoins de futures collaborations avec Nils Ryde (Observatoire de Lund), impliqué dans de grands projets observationnels comme la spectroscopie infrarouge sur l'ELT ou SOFIA, et disposant d'observations obtenues avec le spectrographe TEXES (GEMINI Observatory, 5-25  $\mu\text{m}$ ,  $R \sim 100000$ ), permettront à court et moyen terme de confronter ces résultats théoriques à des observations.

## V.1 Populations

### V.1.1 Résultats

Comme nous l'avons exposé précédemment, MOrad retourne comme solution au système III.18 les populations hors ETL du modèle considéré. Si les écarts à l'ETL sont importants, les populations doivent s'écarter de la distribution de Boltzmann qu'impliquerait un calcul ETL. On voit sur la figure V.1 l'écart relatif entre la population hors ETL et Boltzmanienne de chaque niveau d'énergie de  $\text{H}_2\text{O}$  ortho en fonction de la profondeur dans le modèle d'atmosphère. On remarque que, comme nous l'attendions, les zones profondes de l'atmosphère sont à l'ETL du fait de la forte densité de collisionneurs, et au contraire des effets importants (présupposés au regard des densités critiques) dans le haut de l'atmosphère. Cette différence est très importante car l'on voit un écart de 100% sur beaucoup de niveaux (en particulier ceux de haute énergie).

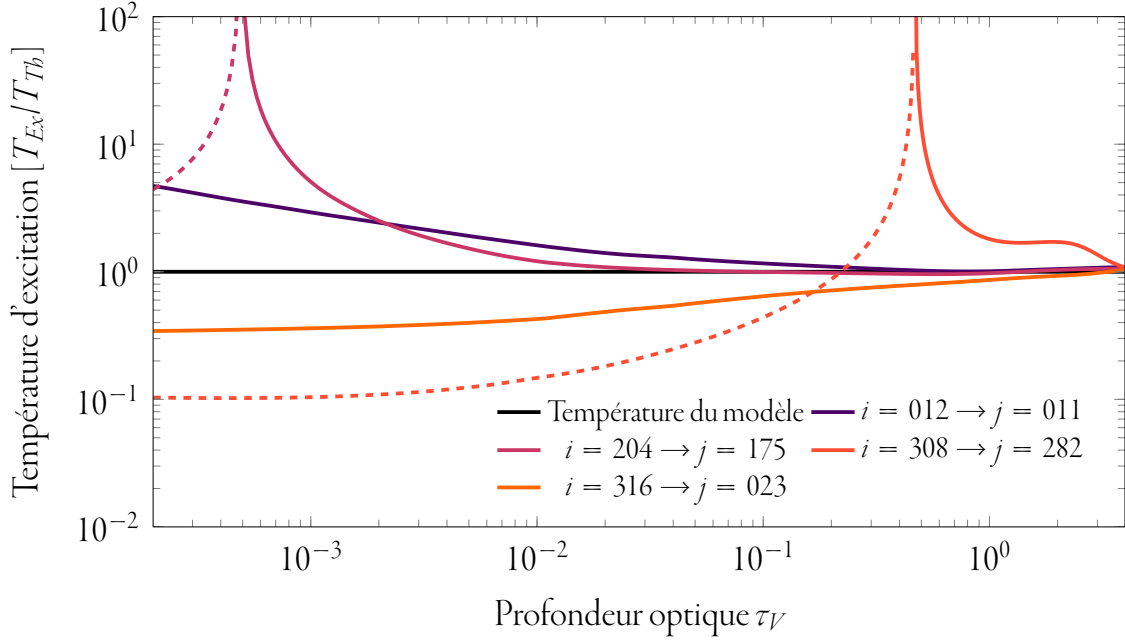


**FIGURE V.1** – *Déviati   normalis  e des populations hors-ETL    la distribution de Boltzmann calcul  e par MORad. On note des   carts importants dans la haute atmosph  re l   o   la densit   de collisionneurs et la plus faible. D  autre part, on remarque que mis    part dans le premier   tat vibrationnel, les   tats rotationnels sont sous-peupl  s mais    l  ETL entre eux.*

### V.1.2 Interpr  tation

Un autre aspect important qui   merge de ce r  sultat est la faible dispersion de l  cart    l  ETL dans un   tat vibrationnel donn  , autre que le niveau fondamental. Cela signifie que les   tats vibrationnels ne sont pas    l  ETL puisque sous-peupl  s par rapport    une distribution Boltzmannienne, mais qu  en revanche les niveaux rotationnels sont    l  ETL entre eux et suivent donc une loi de Boltzmann. Cela est li      la force des transitions radiatives ro-vibrationnelles en comparaison des transitions purement rotationnelles ( $A_{ij} \propto \nu_{ij}^3$ ). Ce comportement avait   t   pr  dit par Thompson (1973) et Hinkle et al. (1973) pour le CO. Notons cependant que cette observation ne s  applique pas au niveau fondamental qui lui pr  sente une forte dispersion. Cette observation permet de valider pour les niveaux sup  rieurs au premier niveau vibrationnel un traitement

approximatif de type « super-niveaux » (voir Schweitzer et al., 2000), qui permet de ne calculer que les populations des niveaux vibrationnels, dans l'approximation où les niveaux rotationnels seraient à l'ETL. Pour expliquer la grande dispersion du premier niveau, il faut savoir que l'on observe une croissance monotone de l'écart à l'ETL en fonction de l'énergie. Comme les niveaux supérieurs sont sous-peuplés, le niveau fondamental est aux contraire globalement sur-peuplé pour vérifier la condition de normalisation, ce qui signifie que contrairement à l'ETL, les canaux rovibrationnels peuplent de manière plus importante les niveaux rotationnels de  $[000]$ . Cette surpopulation est engendrée par les transitions rovibrationnelles provenant des niveaux supérieurs car les taux sont plus forts et non par les niveaux rotationnels. Cette sur-population ne peut pas s'équilibrer, car il n'y a pas de niveaux en dessous. La distribution de cette sur-population est donc liée au nombre de transitions ro-vibrationnelles connectées à ce niveau, et ce nombre diminue avec l'énergie comme on le voit sur la figure I.11. Cela explique la dépendance de l'écart à l'ETL avec l'énergie, car les niveaux de basse énergie reçoivent plus de transitions rovibrationnelles et sont donc surpeuplés, alors que les niveaux de haute énergie, eux, en reçoivent moins.



**FIGURE V.2** – Valeur absolue de la température d'excitation déterminée pour certaines transitions. Les lignes continues correspondent à des valeurs positives de la  $T_{ex}$ , les pointillés à des valeurs négatives. On voit que certaines températures sont négatives, ce qui implique une inversion de population. Cela implique un gain supérieur à 1 et une amplification (MASER local). La transition  $i = 204 \rightarrow j = 175$  (—) correspond à une raie MASER connue à 658.007 GHz (voir Menten & Young, 1995). Il n'est donc pas étonnant que l'on observe une inversion de population, mais on peut ajouter qu'elle commence à croître dans la photosphère.

## V.2 Spectre

### V.2.1 Spectre synthétique : ETL vs hors ETL

L'une des observables principales en astrophysique est le spectre. Il est donc important de quantifier les effets hors ETL sur un spectre photosphérique. Rappelons cependant que pour les supergéantes rouges le spectre photosphérique est difficilement observable, car l'enveloppe contient de l'eau et l'origine des raies n'est pas purement photosphérique (sauf pour les raies de forte excitation).

Ce spectre a été construit en faisant l'hypothèse que  $S_{\nu}^{\text{Tot}} = S_{\nu}^{\text{Cont}} + S_{\nu}^{\text{Raie}}$ , avec

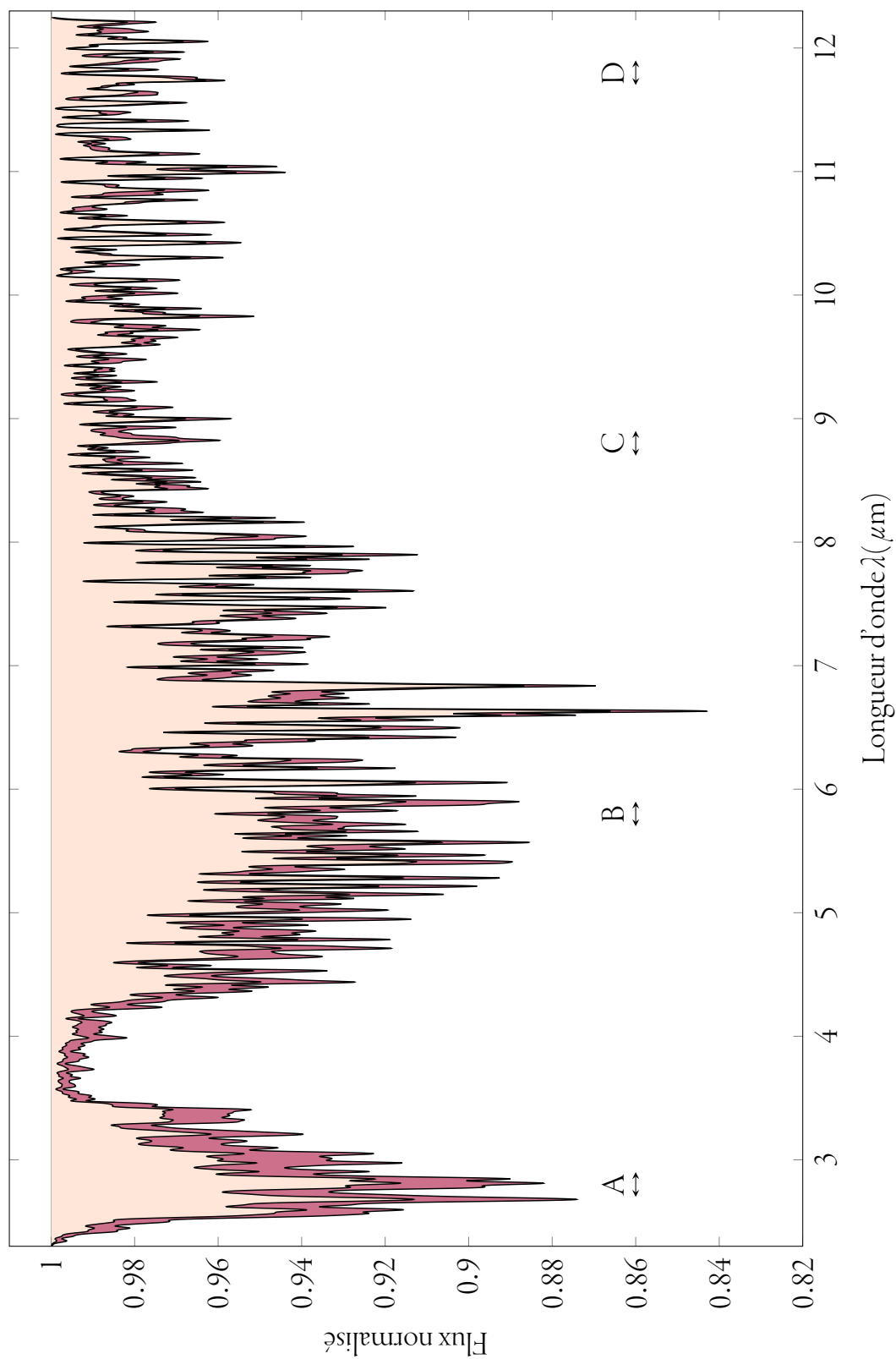
$S_{\nu}^{\text{Cont}} = B_{\nu}(T)$  (i.e. continu à l'ETL) et  $S_{\nu}^{\text{Raie}}$  calculé à partir des populations déterminées par MOrad.

Ainsi pour chaque point d'échantillonnage de chaque raie, on calcule le flux émergent :

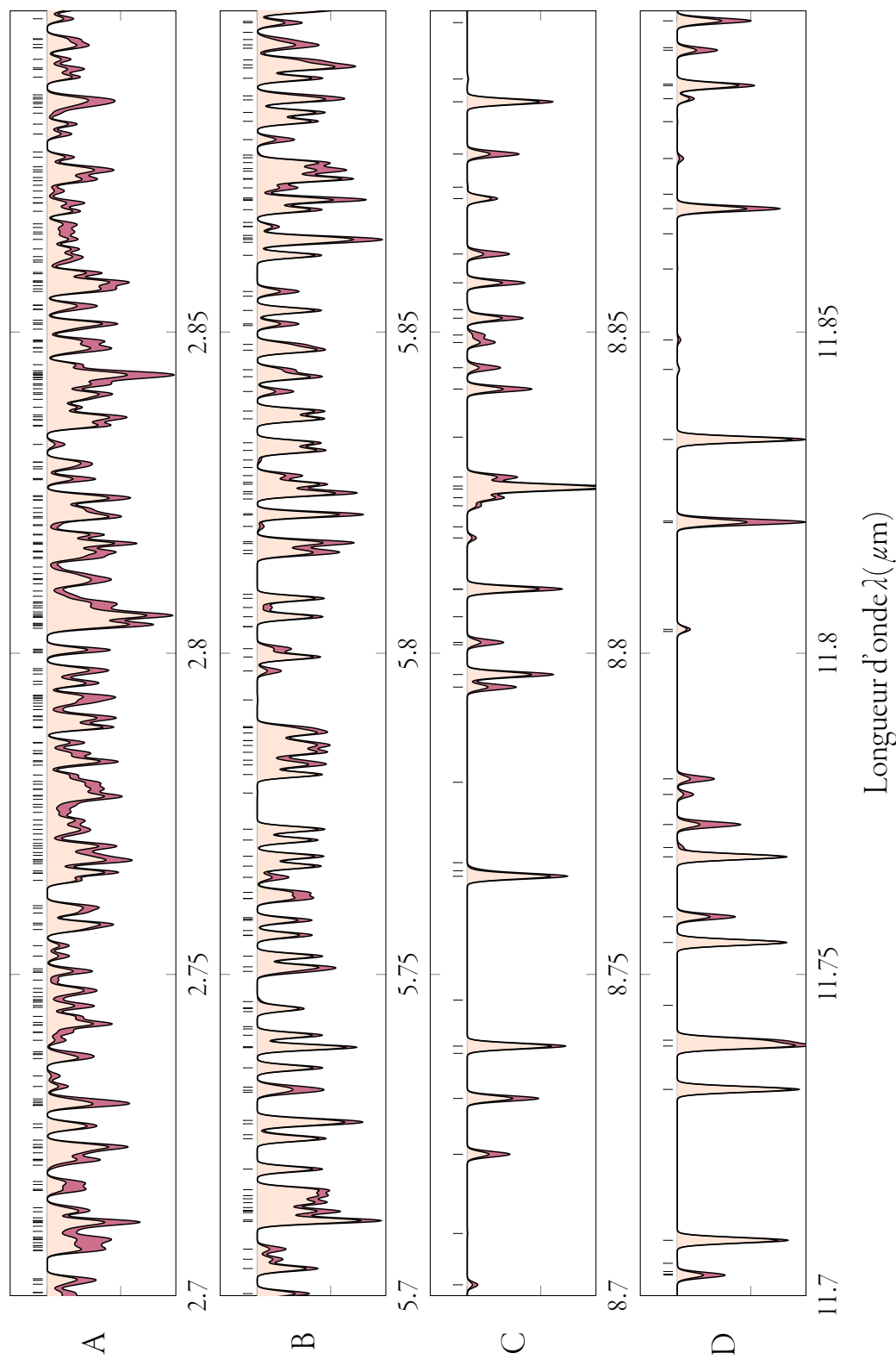
$$\mathcal{F}_{\nu}(\tau_{\nu} = 0) = 2\pi \int_0^{\infty} S_{\nu}(t_{\nu}) E_2(t_{\nu}) dt_{\nu} \quad (\text{V.1})$$

Le spectre à l'ETL est calculé de la même manière en considérant juste que les populations suivent la distribution de Boltzmann.

Afin de rendre le spectre plus lisible, ce dernier est convolué par un profil instrumental et de macroturbulence à l'aide d'un programme de convolution (Fabrice Martins communication privé). (Les paramètres du profil de convolution ne sont choisis qu'en fonction de la lisibilité souhaitée du spectre). Comme on le voit sur les figure V.3 et V.4, les profondeurs des raies obtenus avec un calcul hors ETL sont très différentes de ceux obtenus avec un calcul à l'ETL.



**FIGURE V.3** – Portion du spectre synthétique de  $H_2O$  dans  $\alpha$  Ori à basse résolution. (jaune ETL, Rose NETL)



**FIGURE V.4** – Portion du spectre synthétique de  $H_2O$  dans  $\alpha$  Ori à haute résolution. Les lettres A, B, C, D renvoient à la figure V.3. (jaune ETL, Rose NETL)



## V.2.2 Effets systématiques

On voit que la différence de profondeur des raies est notable dans les bandes rovibrationnelles autour de  $3\mu\text{m}$  par exemple. On y note une forte sur-absorption de l'eau par rapport à un calcul ETL. Cela suggère qu'il est en partie possible d'expliquer la différence notée par Tsuji (2000) sans ajout ad-hoc d'eau dans l'enveloppe, sans nier le fait que plus loin dans la photosphère et dans l'enveloppe ces raies continueront à croître.

Ainsi on peut supposer que les effets hors ETL reproduisent les effets d'une MOLsphère dans une bande donnée. Les paramètres de la « MOLsphère équivalente » peuvent être déterminés par soustraction de ces spectres.

En plan parallèle et en considérant la MOLsphère à l'ETL, on peut déterminer la densité de colonne et la température grâce à cette différence.

$$\mathcal{F}_\nu(0) = 2\pi \int_{\tau_\nu^*}^{\infty} S_\nu^*(t_\nu) E_2(t_\nu) dt_\nu + 2\pi B_\nu(T_{\text{ex}}) \int_0^{\tau_\nu^{\text{in}}} E_2(t_\nu) dt_\nu \quad (\text{V.2})$$

$$\mathcal{F}_\nu(0) = \mathcal{F}_\nu^* + 2\pi B_\nu(T_{\text{ex}}) \left( \frac{1}{2} - E_3(\tau_\nu^{\text{MOL}}) \right) \quad (\text{V.3})$$

On introduit la densité de colonne en posant  $\tau_\nu = N\sigma_\nu = N\alpha_\nu/n$  ce qui permet de déterminer  $\tau_\nu^{\text{MOL}}$  à l'ETL :

$$\tau_\nu^{\text{MOL}} = N \frac{h\nu_{ul}}{4\pi} \frac{g_l}{u(T_{\text{ex}})} e^{-\chi_l/k_B T_{\text{ex}}} B_{lu} \phi_\nu \left( 1 - e^{-h\nu_{ul}/k_B T_{\text{ex}}} \right) \quad (\text{V.4})$$

Ainsi on détermine les deux paramètres en ajustant la différence des spectres :

$$\mathcal{F}_\nu - \mathcal{F}_\nu^* = 2\pi B_\nu(T_{\text{ex}}) \left( \frac{1}{2} - E_3 \left( N \frac{h\nu_{ul}}{4\pi} \frac{g_l}{u(T_{\text{ex}})} e^{-\chi_l/k_B T_{\text{ex}}} B_{lu} \phi_\nu \left( 1 - e^{-h\nu_{ul}/k_B T_{\text{ex}}} \right) \right) \right) \quad (\text{V.5})$$

Notons par ailleurs que l'effet quasi systématique de sur-absorption de l'eau pour les transitions rovibrationnelles aura un effet notable sur la détermination des abondances. Cet effet systématique est bien visible lorsqu'on trace la largeur équivalente ou

la force de raie de chacune d'entre elles en comparaison avec la valeur à l'ETL. Cet écart est d'ailleurs d'autant plus marqué que la fréquence est élevée (voire Fig. V.5).

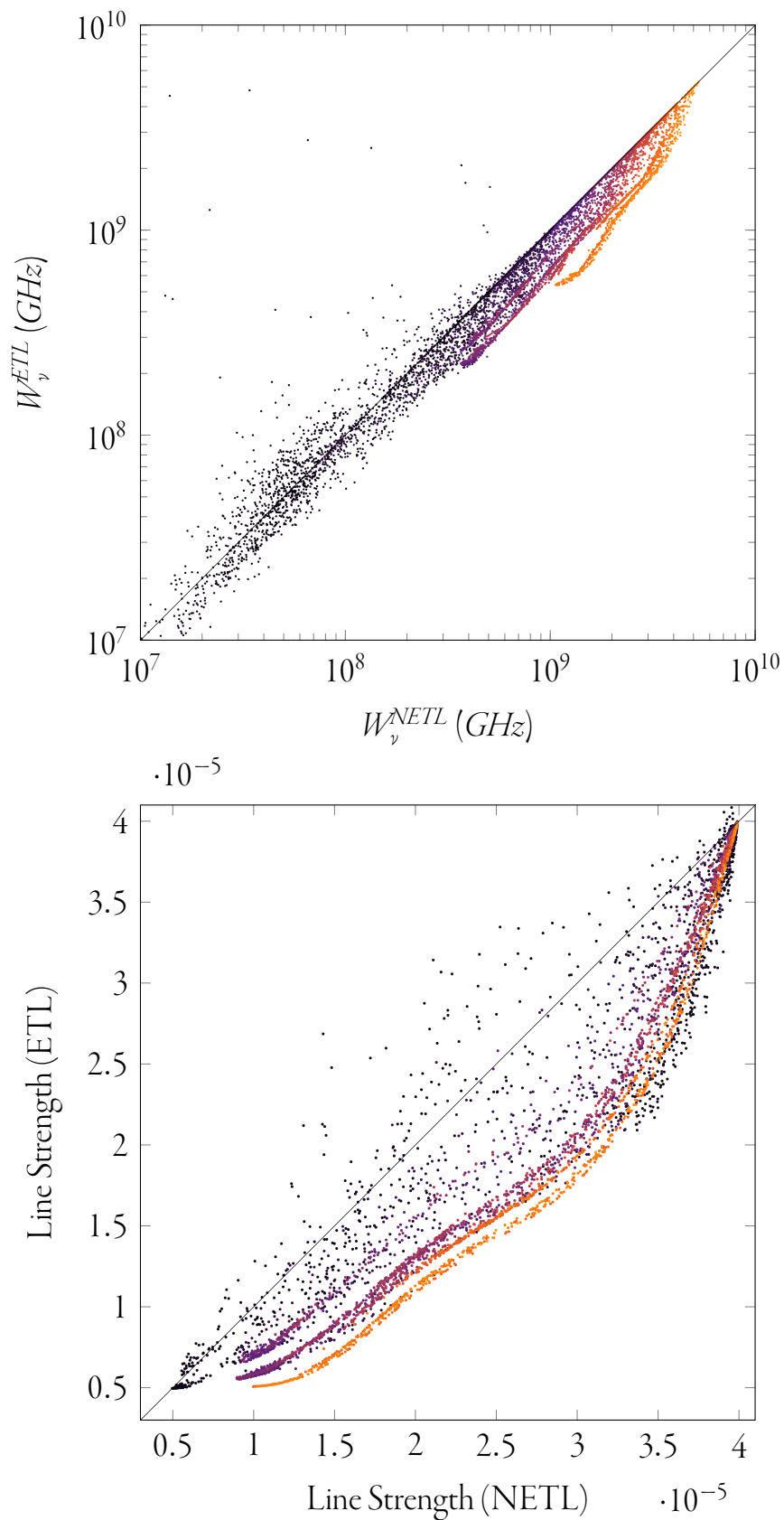
La détermination des abondances est en effet liée à l'interprétation de la largeur équivalente des raies dans le cadre d'un certain nombre d'approximations et en particulier l'ETL. Ainsi, selon le régime (ou position sur la courbe de croissance) on a :

- $W \propto A$  pour les raies faibles
- $W \propto \sqrt{\log A}$  pour les raies fortes dont le cœur Doppler est saturé
- $W \propto \sqrt{A}$  pour les raies très fortes dominées par l'élargissement collisionnel des ailes de raie

Ainsi, par exemple pour les raies faibles en supposant l'ETL, on a :

$$\log \left( \frac{W}{\lambda} \right) = \log \left( \frac{\pi e^2}{m_e c^2} \frac{N_k / N_E}{u_k(T)} N_H \right) + \log(A) + \log(g_k f \lambda) - E_k \mathcal{J} + cst \quad (\text{V.6})$$

On voit donc que la modélisation des largeurs équivalentes influence de manière importante la détermination des abondances et par voie de conséquence, comme évoqué au chapitre I, notre compréhension d'un grand nombre de paramètres physiques des RSG.



**FIGURE V.5** – Comparaison entre ETL / hors ETL des largeurs équivalentes et la force des raies. On observe un effet systématique des raies de haute fréquence qui sont plus profondes que les raies à l'ETL sauf pour les raies fortes

## V.3 Fonction de refroidissement

Un autre aspect important des effets hors ETL est le refroidissement de l'atmosphère par les molécules. En effet, de l'énergie thermique peut être gagnée ou perdue lors des chocs inélastiques au profit du rayonnement. Dans ce cas le milieu se refroidit et cette perte d'enthalpie a des conséquences sur la structure thermodynamique de l'atmosphère. Il est donc essentiel de déterminer si l'approximation ETL a un impact limité ou fort sur le taux de refroidissement.

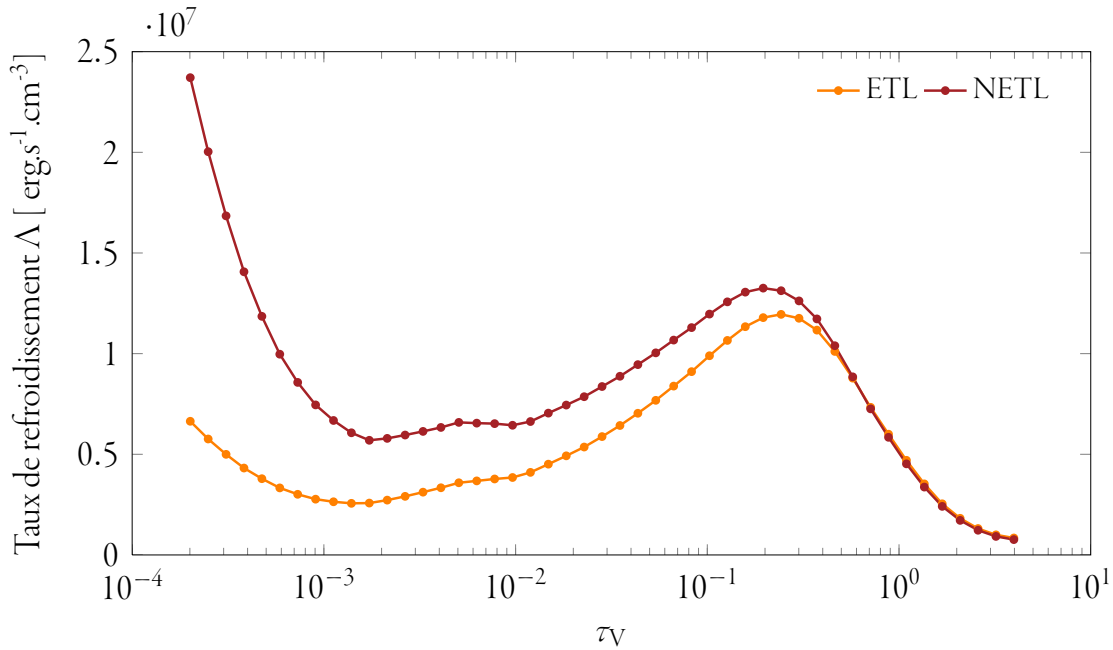
### V.3.1 Taux de refroidissement

En première approximation, l'énergie perdue sous forme radiative en ne considérant que les transitions spontanées, le taux de refroidissement est :

$$\Lambda(\text{H}_2\text{O}) = \sum_{v,J;v',J'} n_{v,J} (E_{v,J} - E_{v',J'}) A(v,J \rightarrow v',J') \quad (\text{V.7})$$

### V.3.2 Résultat

On voit sur la figure V.6 la différence très nette de la fonction de refroidissement entre un calcul ETL et hors ETL. Les conséquences sont donc probablement importantes sur la structure thermodynamique de l'atmosphère.



**FIGURE V.6** – *Fonction de refroidissement calculée à l'ETL et hors ETL. On voit que le refroidissement s'écarte de manière importante dans la haute atmosphère où les effets hors ETL sont les plus forts.*

## V.4 Pression de radiation

Comme nous l'avons mentionné précédemment, un des aspects potentiellement importants des molécules dans les supergéantes est la pression de radiation.

La pression de radiation est définie comme le moment transmis par les photons d'énergie  $h\nu$  sur une surface  $ds$ .

Ainsi la pression transmise par les photons ayant une fréquence comprise entre  $\nu$  et  $\nu + d\nu$  est en coordonnées sphériques :

$$p_\nu = \frac{1}{c} \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi I_\nu \cos^2 \vartheta \sin \vartheta d\vartheta \quad (\text{V.8})$$

Si le rayonnement est isotrope on a :

$$p_\nu = \frac{2\pi}{c} I_\nu \int_0^\pi \mu^2 d\mu = \frac{4\pi}{3c} I_\nu \quad (\text{V.9})$$

---

Ainsi on voit que la pression de radiation varie proportionnellement à l'intensité spécifique. Les effets hors ETL ayant un impact fort sur le spectre ils auront un impacts aussi fort sur la pression de radiation sur les molécules d'eau.



## CONCLUSIONS & PERSPECTIVES

Comme nous l'avons développé au chapitre I, la quantification des effets hors ETL est un enjeu majeur au carrefour de la physique d'un grand nombre de phénomènes en jeu dans les supergéantes rouges. En ce sens, le travail exposé ici contribue de manière forte à la compréhension de la physique des étoiles froides, même si ce travail est encore préliminaire, dans le sens où les résultats présentés au chapitre V sont des résultats comparés à un calcul ETL et non à des observations.

Cette précaution dans l'exposé des résultats est l'expression d'un choix, celui de ne pas vouloir dissimuler les approximations physiques introduites dans les calculs, mais de montrer néanmoins de manière qualitative l'importance majeure des effets hors ETL dans les étoiles froides. Le développement de MOrad a nécessité le dépassement de nombreuses difficultés mathématiques. Il en résulte cependant que le code fonctionne correctement et converge rapidement vers une solution physiquement réaliste. En ce sens, ce travail me semble fructueux en particulier car il répond à un besoin de la communauté astrophysique qui ne dispose pas d'outil capable de traiter des systèmes aussi larges. Cependant, MOrad souffre encore d'un certain nombre d'approximations qu'il est essentiel de pallier. Cette perspective est accessible à moyen voire à court terme car il n'y a plus de difficultés majeures à surmonter et certains de ces points sont déjà à l'étude.

### V.5 Les développements futurs

#### V.5.1 Les ingrédients physiques

**Géométrie** L'une des approximations physiques qui me semble être la plus sensible dans le cadre des supergéantes rouges, est la géométrie plan-parallèle supposée aussi



bien dans le développement analytique que dans l'implémentation de MOrad. À cause de la grande extension de l'atmosphère de ces étoiles, et de la forte non-localité du transfert qui en résulte, la courbure de l'atmosphère aura à coup sûr des effets importants sur le résultat du transfert. Il est donc nécessaire d'implémenter en plus du cas plan parallèle, le cas sphérique.

Les résultats présentés au chapitre V ont été calculés en géométrie plan-parallèle, mais d'ores et déjà, il m'a été possible de déterminer la forme analytique de  $\bar{\mathcal{J}}$  dans le cas sphérique et de trouver des moyens numériques efficaces de déterminer numériquement la valeur du *kernel* sphérique. Ce dernier est plus difficilement intégrable sur les angles solides, mais par intégration par parties successives on peut évaluer ce dernier par le calcul d'une série convergente plus un terme singulier (une intégrale elliptique qui présente une singularité logarithmique en 1 de la même manière que  $E_1$  en plan parallèle possède une singularité en 0). Les difficultés que pose le calcul de la matrice jacobienne ont donc déjà été relevés, reste à les implémenter.

Notons qu'une fois le cas sphérique implémenté, il n'est pas exclu de regarder des géométries 2D ou 3D. La fonction de Green de l'équation de transfert en 3D est probablement intégrable et une évaluation numérique d'un *kernel* 3D probablement accessible. La détermination de  $\bar{\mathcal{J}}$  nécessiterait une intégration triple, mais la dimension du système serait toujours égale à  $N \times P$  ou  $N$  serait le nombre de mailles du modèle. Les résultats présentés au chapitre V ont été calculés avec 56 couches. Si l'on imagine que le temps de calcul de  $\bar{\mathcal{J}}_{1D} \simeq \bar{\mathcal{J}}_{3D}$  le temps de calcul ne dépendant que de  $P$  si l'on parallélise sur  $N$  cœurs, ce dernier restera acceptable dans le cas 3D. La seule limitation serait alors l'espace mémoire lors de la duplication des données nécessaires à la suppression de certaines communications globales.

**Dynamique** Les résultats présentés ont été calculés à partir d'un modèle MARCS statique. Pour mieux comprendre la formation des raies de l'eau, il est nécessaire de s'intéresser à la contribution de l'enveloppe circumstellaire. Or, après la zone de formation du vent, le gradient de vitesse devient important. On peut dès lors ajouter cette contri-

bution en considérant une autres méthode de transfert pour tenir compte du champ de vitesse. Cependant, MOrad a vocation à devenir un code de transfert versatile. Par exemple, si l'on veut inclure les forts champs de vitesse dans les RSG ou les AGB, il est nécessaire d'inclure les décalages Doppler qu'impliquent ces gradients de vitesse. Cela semble relativement simple à intégrer dans MOrad car le profil de raies est calculé et intégré numériquement. Cependant, un décalage impliquerait une modification de l'échantillonnage de la raie à chaque profondeur. On peut cependant résoudre assez facilement ce problème par une redéfinition de l'échantillonnage. Cela nécessitera probablement des communications globales telles que `MPI_ALLREDUCE` et des interpolations supplémentaires, mais permettra en plus de la gestion des champs de vitesse, la possibilité d'inclure l'effet du recouvrement de raies.

**Contribution continue** Comme ce travail visait à déterminer les effets hors ETL dans les raies, la contribution du continu à  $\bar{J}$  a été considérée à l'ETL pour simplifier les calculs. Mais pour ce qui est de la haute atmosphère, il est nécessaire de considérer cette contribution du continu hors ETL à l'aide d'une méthode classique (ALI par exemple).

## V.5.2 Les aspects numériques

**L'hybridation de MOrad** Une des potentialités très intéressantes dont nous avons déjà parlé au chapitre IV est la possibilité d'hybrider MOrad en parallélisant via `OpenMP` les boucles sur les transitions dans les calculs. Cela pose un certain nombre de questions. La première chose est que jusqu'alors le solveur utilisé ne permettait pas d'utiliser la librairie `OpenMP` de manière fiable. Il semble que cela a été résolu dans la dernière version en ligne. D'autre part, l'hybridation d'un code peut être extrêmement performante mais sous certaines conditions. La première de ces conditions est le nombre de cœurs. En effet, en général, l'accélération devient notable quand la taille du système est grand. D'autre part, il est nécessaire que la parallélisation `OpenMP` soit de bonne qualité. Il est extrêmement simple de paralléliser une boucle en `OpenMP` par l'ajout d'une

balise `! \OMP do`, mais cette technique simple n'est pas forcément la plus efficace. On différencie l'approche « *coarse-grained* » et « *fine-grained* », l'une est simple mais pas forcément très efficace, l'autre l'est, mais elle est très intrusive dans le code et demande donc un travail plus important.

D'autre part, la parallélisation **OpenMP**, pour être efficace, demande d'avoir un code très bien optimisé en particulier dans la gestion de la mémoire cache. Une erreur de cache demande un nouvel accès mémoire et donc un surcoût lié au temps de latence qui nuit à l'accélération. Cela implique aussi d'avoir une architecture matérielle bien configurée, en particulier pour que chaque « *thread* » soit accroché à un seul et même cœur pour éviter les erreurs de cache (ce que l'on appelle le « *binding* » des *thread*). Enfin, il est important de réfléchir aux messages **MPI** que l'on échange entre *thread* et comment. Vaut-il mieux plusieurs petits messages entre chaque *thread*, ou un gros message entre processus **MPI** ? La réponse dépend de l'architecture matérielle. L'échange de message implique un temps de latence du réseau. Leur multiplication n'est donc pas une bonne chose, mais un gros message est limité par le débit du réseau. La bonne taille de message est celle qui permet tout juste de saturer le réseau pour exploiter au mieux le réseau sans multiplier les surcoûts de latence.

On voit bien que même s'il est vrai que l'hybridation de MOrad est simple dans les faits, il est nécessaire de se poser un certain nombre de questions avant d'envisager l'hybridation du code afin qu'elle soit suivie de performances accrues.

**L'importance d'être « *user friendly* »** Il est souhaitable que MOrad devienne à court terme un code public, ou en tout cas accessible à la communauté astrophysique. Pour cela, il est nécessaire de développer un certain nombre de scripts (déjà en partie réalisés) permettant une installation et une utilisation simplifiées, voir une interface graphique. Au-delà, un élément important est l'écriture d'une documentation détaillée de la méthode et du code lui-même, ainsi qu'un certain nombre d'exercices de « *Benchmark* » en mesure de déterminer les limites de l'espace des paramètres accessibles.

## D'autres cas astrophysiques

**D'autres effets** Les calculs présentés au chapitre V ont permis de comparer des effets physiques par rapport à l'ETL. Une fois les ingrédients physiques exposés plus haut implémentés dans MOrad, ce dernier deviendra un code de synthèse spectrale hors ETL, et il sera alors légitime d'en tirer des observables. On pourra dès lors construire des courbes de croissance et déterminer des abondances hors ETL, déterminer des pression de radiation et fonction de refroidissement et leur impact sur la  $T_{\text{eff}}$ , le  $\log g$  ou la correction bolométrique. En ajoutant l'enveloppe circumstellaire, il sera possible d'observer les zones où pique la fonction de contribution et de construire des courbes de visibilité plus réalistes et voir si cela répond en partie ou totalement au problème des MOLsphère évoqué au chapitre I.

**D'autres étoiles** Pour le moment, les effets hors ETL n'ont été quantifiés que dans un modèle type de RSG. Or, il est nécessaire d'étudier, outre les conséquences, les paramètres clés qui induisent ces effets hors ETL. Il est donc nécessaire de regarder comment varient ces effets, en fonction des paramètres fondamentaux des étoiles. Cela ne peut se faire que par le calcul du spectre de l'eau dans différents modèles.

**D'autres Molécules** Jusqu'à là, le travail qui a été mené n'a porté que sur la molécule d'eau. Cela est lié au fait que nous ne disposons pas pour le moment de taux de collision suffisamment précis à grand  $J$  et  $\nu$ , (voire les transitions électroniques) pour le CO ou le TiO. Cependant il est probable que ces données seront rapidement disponibles et donc exploitables. La mesure des effets hors ETL liés à ces molécules risque d'être très important et d'avoir des conséquences très importantes sur ce que l'on sait des RSG. Le TiO dominant le spectre optique, les conséquences sur la classification spectrale peuvent être importantes, d'autant plus qu'à plus haute fréquence, on peut supposer que les effets hors ETL vont être importants. Pour le CO dont les bandes se trouvent au maximum d'émission de l'étoile, la modification de son opacité peut

avoir des conséquences importantes sur la structure de l'atmosphère, son extension, sa température, etc.

## Conclusion

Malgré les éléments qui restent à inclure, le travail effectué dans cette thèse a permis de mettre en évidence l'importance des effets hors ETL et d'affirmer d'ores et déjà que la prise en compte de ces effets est une nécessité absolue en ce qui concerne les bandes vibrationnelles de l'eau. D'autre part, ces effets sur le spectre et leur aspect systématique de surabsorption dans ces bandes répondent en partie aux observations d'ISO, qui ont été la cause de l'introduction de modèles *ad hoc* comme les MOLsphères. Il montre d'autre part que les abondances de l'eau sont probablement surestimées et que cela implique des modifications importantes de variables physiques déterminantes dans la structure thermodynamique de l'étoile, comme dans les modèles qui en sont issus. Enfin, il a permis l'introduction d'une méthode de transfert originale et d'un outil en mesure de traiter les effets hors ETL dans des molécules ayant un spectre très riche et dont la complexité rendait ce genre de calcul prohibitif.

## Liste des symboles

**TABLE .1** – *Liste des constantes*

Constantes	Meaning	valeurs (cgs)
$h$	Constante de Planck	$6.626068 \cdot 10^{-27} \text{ erg.s}$
$k_B$	Constante de Boltzmann	$1.380658 \cdot 10^{-16} \text{ erg.K}^{-1}$
$c$	Vitesse de la lumière	$2.997924 \cdot 10^{10} \text{ cm.s}^{-1}$
$M_\star$	Masse de l'étoile	$M_\odot = 1.99 \times 10^{33} \text{ g}$

**TABLE .2** – *Liste des variables physiques*

Symbol	Signification	unité (cgs)
$s$	Longueur géométrique	cm
$t$	temps	s
$\omega$	Angle solide	$\text{rad}^2$
$\omega$	Aire	$\text{cm}^2$
$\mu$	cosinus directeur	$\mu = \cos(\vartheta)$
$T$	Température	K
$v$	Vitesse	$\text{cm.s}^{-1}$
$n_X$	Densité de X	$\text{cm}^{-3}$
$f_i$	Densité relative sur un niveau	$f_i = n_i/n$
$\nu$	Fréquence	$\text{s}^{-1}, \text{Hz}$
$\lambda$	Longueur d'onde	cm
$\mathbf{r}$	Rayon vecteur	cm
$\mathbf{k}$	Vecteur d'onde	cm
$\mathbf{n}$	Vecteur Normal	cm

*Continued on next page*

TABLE .2 – *Continued from previous page*

Symbol	Signification	unité (cgs)
$I_\nu$	Intensité spécifique	$\text{erg.s}^{-1}.\text{cm}^{-2}.\text{rad}^{-2}.\text{Hz}^{-1}$
$\mathcal{J}_\nu$	Intensité moyenne	$\text{erg.s}^{-1}.\text{cm}^{-2}.\text{Hz}^{-1}$
$\tau_\nu$	Epaisseur Optique	$\text{Hz}^{-1}$
$\tau_R$	Moyenne de Rosseland de l'épaisseur	$\text{Hz}^{-1}$
$S_\nu$	Fonction source	$\text{erg.s}^{-1}.\text{cm}^{-2}.\text{rad}^{-2}.\text{Hz}^{-1}$
$B_\nu$	Fonction de Planck	$\text{erg.s}^{-1}.\text{cm}^{-2}.\text{rad}^{-2}.\text{Hz}^{-1}$
$\sigma_\nu^X$	Section efficaces de $X$	
$\chi_\nu^X$	Coefficient d'Extinction monochromatique de $X$	$\text{cm}^{-1}.\text{Hz}^{-1}$
$\eta_\nu^X$	Coefficient d'emissivité monochromatique de $X$	$\text{erg.s}^{-1}.\text{cm}^{-3}.\text{rad}^{-2}.\text{Hz}^{-1}$
$\beta_\nu$	Probabilité d'échappement	
$\rho_\nu$	« <i>Net radiative bracket</i> »	
$\varepsilon$	probabilité de destruction	
$l$	Libre parcours moyen	cm
$A_{ul}$	Coefficient d'Einstein (Désexcitation spontanée)	$\text{s}^{-1}$
$B_{ul}$	Coefficient d'Einstein ((Dé)s)excitation Induite)	$\text{erg}^{-1}.\text{s}^{-1}.\text{cm}^2.\text{rad}^2$
$C_{ul}$	Taux de collision $C_{ul} = n_{\text{col}}\gamma_{ul}(T)$	$\text{s}^{-1}$
$g_i$	dégénérecence du niveau $i$	
$E_i$	Energie du niveaux $i$	erg
$g_{\text{ff}}/g_{\text{bf}}$	facteur de Gaunte	cm
$\mathcal{R}$	Fonction de redistribution	$\text{Hz}^{-2}.\text{s}^{-2}$
$\mathcal{P}$	Fonction de phase	$\text{Hz}^{-2}$
$\phi_\nu$	profil d'émission spontanée	cm
$\varphi_\nu$	profil d'émission stimulé	cm
$\psi_\nu$	profil d'absorption stimulé	cm

**TABLE .3** – *List des fonctions, opérateurs, et distributions*

Fonction <sup>1</sup>	Signification	Formule
$E_n(x)$	n <sup>e</sup> Exponentielle intégrale	$E_n = \int_1^{\infty} \frac{e^{-xt}}{t^n} dt$
$B_\nu(T)$	Fonction de Planck	$B_\nu(T) = \frac{2h\nu^3}{c^2} \frac{1}{e^{h\nu/k_B T} - 1}$
$\delta(x)$	Distribution de Dirac	$\delta(x) = \begin{cases} +\infty & \text{si } x = 0 \\ 0 & \text{si } x \neq 0. \end{cases}$ $\int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x) dx = 1$
$\Pi_{a,b}(x)$	Fonction porte généralisé	$\Pi_{a,b}(x) = \Pi((x - (b + a)/2)/(b - a))$
$\Pi(x)$	Fonction porte	$\Pi(x) = H(x + 1/2) - H(x - 1/2)$
$H(x)$	Fonction Heaviside	$H(x) = \begin{cases} 0 & \text{si } x < 0 \\ 1 & \text{si } x > 0. \end{cases}$
$\mathcal{L}$	Transformée de Laplace	$\mathcal{L}[f(x); s] = \int_0^{\infty} e^{-xs} f(x) dx$
$\mathcal{G}$	Fonction de Green	$\mathcal{L}\mathcal{G}(x, s) = \delta(x - s)$
$\mathcal{L}$	Opérateur linéaire	$\mathcal{L}(ax_1 + \beta x_2) = a\mathcal{L}(x_1) + \beta\mathcal{L}(x_2)$
$\bar{f}$	Intégration pondérée par un profil	$\bar{f} = \int_{-\infty}^{+\infty} f_\nu \phi_\nu d\nu$



## Demonstrations

$$\mu \frac{dI_\nu}{ds} = - (\chi_\nu^{\text{Cont}} + \chi_\nu^{\text{Raie}}) I_\nu + \eta_\nu^{\text{Cont}} + \eta_\nu^{\text{Raie}} \quad (10)$$

or d'après (II.18), (II.12) et (II.25) on a

$$\eta_\nu^{\text{Raie}} = \frac{h\nu_{ij}}{4\pi} n_i A_{ij} \phi_\nu \quad (11)$$

$$\chi_\nu^{\text{Raie}} = \frac{h\nu_{ij}}{4\pi} (n_j B_{ji} - n_i B_{ij}) \phi_\nu \quad (12)$$

On pose la population relative  $f_k = n_k/n_{\text{H}_2\text{O}}$

$$\eta_\nu^{\text{Raie}} = \frac{h\nu_{ij}}{4\pi} f_i n_{\text{H}_2\text{O}} A_{ij} \phi_\nu \quad (13)$$

$$\chi_\nu^{\text{Raie}} = \frac{h\nu_{ij}}{4\pi} (f_j n_{\text{H}_2\text{O}} B_{ji} - f_i n_{\text{H}_2\text{O}} B_{ij}) \phi_\nu \quad (14)$$

On fait apparaitre la variable  $x_k = f_k/g_k$

$$\eta_\nu^{\text{Raie}} = \frac{h\nu_{ij}}{4\pi} g_i \frac{f_i}{g_i} n_{\text{H}_2\text{O}} A_{ij} \phi_\nu = \frac{h\nu_{ij}}{4\pi} g_i x_i n_{\text{H}_2\text{O}} A_{ij} \phi_\nu \quad (15)$$

$$\chi_\nu^{\text{Raie}} = \frac{h\nu_{ij}}{4\pi} g_i \left( \frac{f_j}{g_j} n_{\text{H}_2\text{O}} B_{ji} - \frac{f_i}{g_i} n_{\text{H}_2\text{O}} B_{ij} \right) \phi_\nu \quad (16)$$

or  $B_{ji}g_i = B_{ij}g_j$

$$\chi_\nu^{\text{Raie}} = \frac{h\nu_{ij}}{4\pi} B_{ij} g_i n_{\text{H}_2\text{O}} (x_j - x_i) \phi_\nu \quad (17)$$

En introduisant la formulation de  $\chi_\nu^{\text{Raie}}$  et  $\eta_\nu^{\text{Raie}}$  dans l'équation de transfert on obtient :

$$\mu \frac{dI_\nu}{ds} = - \left( \chi_\nu^{\text{Cont}} + \frac{h\nu_{ij}}{4\pi} B_{ij} g_i n_{\text{H}_2\text{O}} (x_j - x_i) \phi_\nu \right) I_\nu + \eta_\nu^{\text{Cont}} + \frac{h\nu_{ij}}{4\pi} g_i x_i n_{\text{H}_2\text{O}} A_{ij} \phi_\nu \quad (18)$$

afin de créer une échelle indépendante de la fréquences de transition, on divise l'équation précédente par  $\chi_{500} = n_H \tilde{\chi}_{500}$

$$\begin{aligned} \mu \frac{dI_\nu}{\chi_{500} ds} = & \frac{\tilde{\chi}_\nu}{\tilde{\chi}_{500}} \frac{n_H}{n_H} + \frac{h\nu_{ij}}{4\pi} B_{ij} g_i \frac{n_{H_2O}}{n_H \tilde{\chi}_{500}} (x_j - x_i) \phi_\nu \\ & - \frac{h\nu_{ij}}{4\pi} g_i x_i \frac{n_{H_2O}}{n_H \tilde{\chi}_{500}} A_{ij} \phi_\nu - \frac{\eta_\nu^{\text{Cont}}}{n_H \tilde{\chi}_{500}} \frac{n_H \tilde{\chi}_\nu^{\text{Cont}}}{\chi_\nu^{\text{Cont}}} \end{aligned} \quad (19)$$

Ainsi en posant  $\xi_\nu = \frac{\tilde{\chi}_\nu}{\tilde{\chi}_{500}}$ ,  $E_{ij} = \frac{h\nu_{ij}}{4\pi} B_{ij} g_i$ ,  $\zeta = \frac{n_{H_2O}}{n_H \tilde{\chi}_{500}}$ ,  $D_{ij} = \frac{h\nu_{ij}}{4\pi} A_{ij} g_i$ , et  $B_\nu = \frac{\eta_\nu^{\text{Cont}}}{\chi_\nu^{\text{Cont}}}$ , on obtient :

$$\mu \frac{dI_\nu}{d\tau_{500}} = [\xi_\nu + E_{ij} \zeta \phi_\nu (x_j - x_i)] I_\nu - D_{ij} x_i \zeta \phi_\nu - \xi_\nu B_\nu \quad (20)$$

## Sources d'opacités

**TABLE .4 –** *Références pour le calcul des principales opacités*

Processus	référence
HI <sub>bf</sub> , HI <sub>ff</sub>	Karzas & Latter (1961)
H <sup>-</sup> <sub>bf</sub>	Wishart (1979)
H <sup>-</sup> <sub>ff</sub>	Bell & Berrington (1987)
H <sub>2ff</sub>	John (1975b,a) et John & Williams (1975)
H <sub>2</sub> scattering	Dalgarno & Williams (1962)
e <sup>-</sup> scattering	Mihalas (1978)



## BIBLIOGRAPHIE

- ABRAMOWITZ, M. & I. A. STEGUN (1972), *Handbook of Mathematical Functions*.
- ASENSIO RAMOS, A., J. TRUJILLO BUENO, M. CARLSSON, & J. CERNICHARO (2003), “Nonequilibrium CO Chemistry in the Solar Atmosphere,” in *ApJ volume 588*, pages L61–L64.
- AUER, L. H. (1987), *Acceleration of Convergence*, 101.
- AUER, L. (1991), “Acceleration of Convergence,” in L. Crivellari, I. Hubeny, & D. G. Hummer, editors, “NATO ASIC Proc. 341 : Stellar Atmospheres - Beyond Classical Models,” 9.
- AUER, L. H. & D. MIHALAS (1969), “Non-Lte Model Atmospheres. III. a Complete-Linearization Method,” in *ApJ volume 158*, page 641.
- AURIÈRE, M., J.-F. DONATI, R. KONSTANTINOVA-ANTOVA, G. PERRIN, P. PETIT, & T. ROUDIER (2010), “The magnetic field of Betelgeuse : a local dynamo from giant convection cells ?” in *A&A volume 516*, L2.
- AVRETT, E. H. & D. G. HUMMER (1965), “Non-coherent scattering, II : Line formation with a frequency independent source function,” in *mnras volume 130*, page 295.
- BARBER, R. J., J. TENNYSON, G. J. HARRIS, & R. N. TOLCHENOV (2006), “A high-accuracy computed water line list,” in *MNRAS volume 368*, pages 1087–1094.
- BELL, K. L. & K. A. BERRINGTON (1987), “Free-free absorption coefficient of the negative hydrogen ion,” in *Journal of Physics B Atomic Molecular Physics volume 20*, pages 801–806.

- BRUNISH, W. M., J. S. GALLAGHER, & J. W. TRURAN (1986), "Blue-to-red ratios as tests for theoretical models of massive stars," in *AJ* volume 91, pages 598–601.
- CANNON, C. J. (1973a), "Angular quadrature perturbations in radiative transfer theory," in *J. Quant. Spec. Radiat. Transf.* volume 13, pages 627–633.
- CANNON, C. J. (1973b), "Frequency-Quadrature Perturbations in Radiative-Transfer Theory," in *ApJ* volume 185, pages 621–630.
- CARPENTER, K. G., R. D. ROBINSON, G. M. WAHLGREN, J. L. LINSKY, & A. BROWN (1994), "GHRs observations of cool, low-gravity stars. 1 : The far-ultraviolet spectrum of alpha Orionis (M2 lab)," in *ApJ* volume 428, pages 329–344.
- CHERCHNEFF, I. (2006), "A chemical study of the inner winds of asymptotic giant branch stars," in *A&A* volume 456, pages 1001–1012.
- CHEVALLIER, L., F. PALETOU, & B. RUTILY (2003), "On the accuracy of the ALI method for solving the radiative transfer equation," in *A&A* volume 411, pages 221–227.
- CONTI, P. S. (1975), "On the relationship between Of and WR stars," in *Memoires of the Societe Royale des Sciences de Liege* volume 9, pages 193–212.
- DALGARNO, A. & D. A. WILLIAMS (1962), "Rayleigh Scattering by Molecular Hydrogen," in *ApJ* volume 136, pages 690–692.
- DAMGAARD, P. H., P. G. HJORTH, & P. A. THEJLL (1992), "A Note on Positivity of Equilibrium Populations in Radiative Transfer Theory," in *A&A* volume 254, page 422.
- DANCHI, W. C., M. BESTER, C. G. DEGIACOMI, L. J. GREENHILL, & C. H. TOWNES (1994), "Characteristics of dust shells around 13 late-type stars," in *AJ* volume 107, pages 1469–1513.

- DUBERNET, M.-L., F. DANIEL, A. GROSJEAN, & C. Y. LIN (2009), “Rotational excitation of ortho- $\text{H}_2\text{O}$  by para- $\text{H}_2$  ( $j_2 = 0, 2, 4, 6, 8$ ) at high temperature,” in *A&A volume 497*, pages 911–925.
- ELITZUR, M., editor (1992), *Astronomical masers, Astrophysics and Space Science Library*, volume 170.
- FAURE, A., N. CRIMIER, C. CECCARELLI, P. VALIRON, L. WIESENFELD, & M. L. DUBERNET (2007), “Quasi-classical rate coefficient calculations for the rotational (de)excitation of  $\text{H}_2\text{O}$  by  $\text{H}_2$ ,” in *A&A volume 472*, pages 1029–1035.
- FAURE, A. & E. JOSSELIN (2008), “Collisional excitation of water in warm astrophysical media. I. Rate coefficients for rovibrationally excited states,” in *A&A volume 492*, pages 257–264.
- FREEDMAN, DAVID (1983), *Markov chains*, New York : Springer.
- FREYTAG, B., M. STEFFEN, & B. DORCH (2002), “Spots on the surface of Betelgeuse – Results from new 3D stellar convection models,” in *Astronomische Nachrichten volume 323*, pages 213–219.
- GONZALEZ GARCIA, M., J. LE BOURLOT, F. LE PETIT, & E. ROUEFF (2008), “Radiative transfer revisited for emission lines in photon dominated regions,” in *A&A volume 485*, pages 127–136.
- GRINSTEAD, CHARLES M. & LAURIE J. SNELL (2006), *Grinstead and Snell’s Introduction to Probability*, American Mathematical Society, version dated 4 july 2006 edition.
- GUÉLIN, M., R. LUCAS, & R. NERI (1996), “AGB Star Envelopes as Probes of Stellar Evolution and Time-Dependent Chemistry,” in P. A. Shaver, editor, “Science with Large Millimetre Arrays,” 276.

GUSTAFSSON, B., B. EDVARDSSON, K. ERIKSSON, U. G. JØRGENSEN, Å. NORDLUND, & B. PLEZ (2008), “A grid of MARCS model atmospheres for late-type stars. I. Methods and general properties,” in *A&A volume 486*, pages 951–970.

HABING, H. J. & H. OLOFSSON, editors (2003), *Asymptotic giant branch stars*.

HARPER, G. M. (2010), “On Highly Clumped Magnetic Wind Models for Cool Evolved Stars,” in *ApJ volume 720*, pages 1767–1771.

HARPER, G. M., A. BROWN, & J. LIM (2001), “A Spatially Resolved, Semiempirical Model for the Extended Atmosphere of  $\alpha$  Orionis (M2 Iab),” in *ApJ volume 551*, pages 1073–1098.

HAUBOIS, X., G. PERRIN, S. LACOUR, T. VERHOELST, S. MEIMON, L. MUGNIER, E. THIÉBAUT, J. P. BERGER, S. T. RIDGWAY, J. D. MONNIER, R. MILLAN-GABET, & W. TRAUB (2009), “Imaging the spotty surface of Betelgeuse in the H band,” in *A&A volume 508*, pages 923–932.

HELLUY, P., S. MAIRE, & P. RAVEL (1998), “Intégration numérique d’ordre élevé de fonctions régulières ou singulières sur un intervalle,” in *Academie des Sciences Paris Comptes Rendus Serie Sciences Mathematiques volume 327*, pages 843–848.

HINKLE, K. H., D. L. LAMBERT, & E. A. MALLIA (1973), “Molecular Spectra in Cool Stars : Lessons from Solar Spectroscopy ?” in H. R. Johnson, J. P. Mutschlecner, & B. F. Peery, editors, “Red Giant Stars,” 63.

HÖFNER, S. (2007), “Headwind : Modelling Mass Loss of AGB Stars, Against All Odds,” in F. Kerschbaum, C. Charbonnel, & R. F. Wing, editors, “Why Galaxies Care About AGB Stars : Their Importance as Actors and Probes,” *Astronomical Society of the Pacific Conference Series*, volume 378, 145.

- HÖFNER, S. & A. C. ANDERSEN (2007), “Winds of M- and S-type AGB stars : an unorthodox suggestion for the driving mechanism,” in *A&A volume 465*, pages L39–L42.
- HUBENY, I. (2001), “From Escape Probabilities to Exact Radiative Transfer,” in G. Ferland & D. W. Savin, editors, “Spectroscopic Challenges of Photoionized Plasmas,” *Astronomical Society of the Pacific Conference Series*, volume 247, 197.
- HUMPHREYS, R. M. (1978), “Studies of luminous stars in nearby galaxies. I. Supergiants and O stars in the Milky Way,” in *ApJS volume 38*, pages 309–350.
- IRONS, F. E. (1978), “On the equality of the mean escape probability and mean net radiative bracket for line photons,” in *MNRAS volume 182*, pages 705–709.
- JOHN, T. L. (1975a), “The continuous absorption coefficient of atomic and molecular negative ions,” in *MNRAS volume 172*, pages 305–311.
- JOHN, T. L. (1975b), “The free-free transitions of atomic and molecular negative ions in the infrared,” in *MNRAS volume 170*, page 5.
- JOHN, T. L. & R. J. WILLIAMS (1975), “The continuous absorption coefficient of the negative oxygen ion in the infrared,” in *MNRAS volume 171*, pages 7P–10P.
- JOHNSON, H. B. (1994), “Effects of Non-Local Thermodynamic Equilibrium (NLTE) on Molecular Opacities,” in U. G. Jorgensen, editor, “IAU Colloq. 146 : Molecules in the Stellar Environment,” *Lecture Notes in Physics, Berlin Springer Verlag*, volume 428, 234.
- JORGENSEN, U. G. (1994), “Dominating Molecules in the Photosphere of Cool Stars,” in U. G. Jorgensen, editor, “IAU Colloq. 146 : Molecules in the Stellar Environment,” *Lecture Notes in Physics, Berlin Springer Verlag*, volume 428, 29.



- JOSSELIN, E. & B. PLEZ (2007), “Atmospheric dynamics and the mass loss process in red supergiant stars,” in *A&A volume 469*, pages 671–680.
- KAHANE, C., E. DUFOUR, M. BUSSO, R. GALLINO, M. LUGARO, M. FORESTINI, & O. STRANIERO (2000), “Improved isotopic ratio determinations in IRC+10216, the progenitor mass and the s process,” in *A&A volume 357*, pages 669–676.
- KARZAS, W. J. & R. LATTER (1961), “Electron Radiative Transitions in a Coulomb Field,” in *ApJS volume 6*, page 167.
- KURUCZ, R. L. (1992), “Model Atmospheres for Population Synthesis,” in B. Barbuy & A. Renzini, editors, “The Stellar Populations of Galaxies,” *IAU Symposium*, volume 149, 225.
- LEVESQUE, E. M. (2010), “The physical properties of red supergiants,” in *New A Rev. volume 54*, pages 1–12.
- LEVESQUE, E. M., P. MASSEY, K. A. G. OLSEN, B. PLEZ, E. JOSSELIN, A. MAEDER, & G. MEYNET (2005), “The Effective Temperature Scale of Galactic Red Supergiants : Cool, but Not As Cool As We Thought,” in *ApJ volume 628*, pages 973–985.
- LEVESQUE, E. M., P. MASSEY, K. A. G. OLSEN, B. PLEZ, G. MEYNET, & A. MAEDER (2006), “The Effective Temperatures and Physical Properties of Magellanic Cloud Red Supergiants : The Effects of Metallicity,” in *ApJ volume 645*, pages 1102–1117.
- LEVINE, R. D. (1978), “Information Theory Approach to Molecular Reaction Dynamics,” in *Annual Review of Physical Chemistry volume 29*, pages 59–92.
- MAEDER, A. (2009), *Physics, Formation and Evolution of Rotating Stars*.
- MASSEY, P. (1998), “Evolved Massive Stars in the Local Group. I. Identification of Red Supergiants in NGC 6822, M31, and M33,” in *ApJ volume 501*, page 153.

- MASSEY, P. (2003), "MASSIVE STARS IN THE LOCAL GROUP : Implications for Stellar Evolution and Star Formation," in *ARA&A volume 41*, pages 15–56.
- MASSEY, P. & K. A. G. OLSEN (2003), "The Evolution of Massive Stars. I. Red Supergiants in the Magellanic Clouds," in *AJ volume 126*, pages 2867–2886.
- MAURON, N. & P.J. HUGGINS (1999), "Multiple shells in the circumstellar envelope of IRC+10216," in *A&A volume 349*, pages 203–208.
- MAURON, N. & P.J. HUGGINS (2006), "Imaging the circumstellar envelopes of AGB stars," in *A&A volume 452*, pages 257–268.
- MAURON, N. & E. JOSSELIN (2011), "The mass-loss rates of red supergiants and the de Jager prescription," in *A&A volume 526*, A156.
- MENTEN, K. M. & K. YOUNG (1995), "Discovery of Strong Vibrationally Excited Water Masers at 658 GHz Toward Evolved Stars," in *ApJ volume 450*, page L67.
- MEYNET, G. & A. MAEDER (2000), "Stellar evolution with rotation. V. Changes in all the outputs of massive star models," in *A&A volume 361*, pages 101–120.
- MIHALAS, D. (1978), *Stellar atmospheres /2nd edition/*.
- NAUMENKO, O. & A. CAMPARGUE (2003), "Rovibrational analysis of the absorption spectrum of H<sub>2</sub>O around 1.02  $\mu$ m by ICLAS-VECSEL," in *Journal of Molecular Spectroscopy volume 221*, pages 221–226.
- NG, K.-C. (1974), "Hypernetted chain solutions for the classical one-component plasma up to Gamma equals 7000," in *J. Chem. Phys. volume 61*, pages 2680–2689.
- NORRIS, B. R. M., P. G. TUTHILL, M. J. IRELAND, S. LACOUR, A. A. ZIJLSTRA, F. LYKOU, T. M. EVANS, P. STEWART, & T. R. BEDDING (2012), "A close halo of large transparent grains around extreme red giant stars," in *Nature volume 484*, pages 220–222.

NOWOTNY, W., S. HÖFNER, & B. ARINGER (2010), “Line formation in AGB atmospheres including velocity effects. Molecular line profile variations of long period variables,” in *A&A volume 514*, A35.

OHNAKA, K. (2004), “Warm water vapor envelope in the supergiants  $\alpha$  Ori and  $\alpha$  Her and its effects on the apparent size from the near-infrared to the mid-infrared,” in *A&A volume 421*, pages 1149–1158.

OLSON, G. L., L. H. AUER, & J. R. BUCHLER (1986), “A rapidly convergent iterative solution of the non-LTE line radiation transfer problem,” in *J. Quant. Spec. Radiat. Transf. volume 35*, pages 431–442.

OSTERBROCK, D. E. (1974), *Astrophysics of gaseous nebulae*.

PALETOU, F. & L. LÉGER (2007), “Fast multilevel radiative transfer,” in *J. Quant. Spec. Radiat. Transf. volume 103*, pages 57–66.

PATEL, N. A., K. H. YOUNG, C. A. GOTTLIEB, P. THADDEUS, R. W. WILSON, K. M. MENTEN, M. J. REID, M. C. MCCARTHY, J. CERNICHAO, J. HE, S. BRÜNKEN, D.-V. TRUNG, & E. KETO (2011), “An Interferometric Spectral-line Survey of IRC+10216 in the 345 GHz Band,” in *ApJS volume 193*, 17.

PERAIAH, A. (2001), *An Introduction to Radiative Transfer : Methods and Applications in Astrophysics*.

PERRIN, G., S. T. RIDGWAY, T. VERHOELST, P. A. SCHULLER, V. COUDÉ DU FORESTO, W. A. TRAUB, R. MILLAN-GABET, & M. G. LACASSE (2005), “Study of molecular layers in the atmosphere of the supergiant star  $\mu$  Cep by interferometry in the K band,” in *A&A volume 436*, pages 317–324.

RUSCIC, BRANKO, ALBERT F. WAGNER, LAWRENCE B. HARDING, ROBERT L. ASHER, DAVID FELLER, DAVID A. DIXON, KIRK A. PETERSON, YANG SONG,

- XIMEI QIAN, CHEUK-YIU NG, JIANBO LIU, WENWU CHEN, & DAVID W. SCHWENKE (2002), "On the enthalpy of formation of hydroxyl radical and gas-phase bond dissociation energies of water and hydroxyl," in *The Journal of Physical Chemistry A* volume 106 (11), pages 2727–2747.
- RYBICKI, G. B. (1997), "Properties of Statistical Equilibrium Equations : Positivity and Uniqueness," in *ApJ* volume 479, page 357.
- RYBICKI, G. B. & D. G. HUMMER (1991), "An accelerated lambda iteration method for multilevel radiative transfer. I - Non-overlapping lines with background continuum," in *A&A* volume 245, pages 171–181.
- RYBICKI, G. B. & D. G. HUMMER (1992), "An accelerated lambda iteration method for multilevel radiative transfer. II - Overlapping transitions with full continuum," in *A&A* volume 262, pages 209–215.
- RYBICKI, G. B. & A. P. LIGHTMAN (1979), *Radiative processes in astrophysics*.
- RYDE, N., G. M. HARPER, M. J. RICHTER, T. K. GREATHOUSE, & J. H. LACY (2006), "Water Vapor on Betelgeuse as Revealed by TEXES High-Resolution 12  $\mu\text{m}$  Spectra," in *ApJ* volume 637, pages 1040–1055.
- SAAD, YUCEF & MARTIN H SCHULTZ (1986), "Gmres : a generalized minimal residual algorithm for solving nonsymmetric linear systems," in *SIAM J. Sci. Stat. Comput.* volume 7 (3), pages 856–869.
- SCHARMER, G. B. (1981), "Solutions to radiative transfer problems using approximate lambda operators," in *ApJ* volume 249, pages 720–730.
- SCHWARZSCHILD, M. (1975), "On the scale of photospheric convection in red giants and supergiants," in *ApJ* volume 195, pages 137–144.

- SCHWEITZER, A., P. H. HAUSCHILDT, & E. BARON (2000), "Non-LTE Treatment of Molecules in the Photospheres of Cool Stars," in *ApJ volume 541*, pages 1004–1015.
- SHIRIN, S. V., O. L. POLYANSKY, N. F. ZOBOV, P. BARLETTA, & J. TENNYSON (2003), "Spectroscopically determined potential energy surface of H<sub>2</sub><sup>16</sup>O up to 25 000 cm<sup>-1</sup>," in *J. Chem. Phys. volume 118*, pages 2124–2129.
- SMITH, N., R. M. HUMPHREYS, K. DAVIDSON, R. D. GEHRZ, M. T. SCHUSTER, & J. KRAUTTER (2001), "The Asymmetric Nebula Surrounding the Extreme Red Supergiant Vy Canis Majoris," in *AJ volume 121*, pages 1111–1125.
- SOBOLEV, V. V. (1960), *Moving envelopes of stars*.
- STIEFEL, E. L. (1959), "Numerical methods of Tchebychev approximation," in R. E. Langer, editor, "On numerical approximation," Wisconsin Univ. Press.
- TENENBAUM, E. D., J. L. DODD, S. N. MILAM, N. J. WOOLF, & L. M. ZIURYS (2010), "Comparative Spectra of Oxygen-rich Versus Carbon-rich Circumstellar Shells : VY Canis Majoris and IRC +10216 at 215-285 GHz," in *ApJ volume 720*, pages L102–L107.
- TENNYSON, J. (2002), "Ab initio rotation-vibration energy levels of triatomics to spectroscopic accuracy," in *Spectrochimica Acta Part A : Molecular Spectroscopy volume 58*, pages 663–672.
- TENNYSON, J., N. F. ZOBOV, R. WILLIAMSON, O. L. POLYANSKY, & P. F. BERNATH (2001), "Experimental Energy Levels of the Water Molecule," in *Journal of Physical and Chemical Reference Data volume 30*, pages 735–831.
- THOMPSON, R. I. (1973), "Conditions for Carbon Monoxide Vibration-Rotation LTE in Late Stars," in *ApJ volume 181*, pages 1039–1054.

- TRUJILLO BUENO, J. & P. FABIANI BENDICHO (1995), “A Novel Iterative Scheme for the Very Fast and Accurate Solution of Non-LTE Radiative Transfer Problems,” in *ApJ volume 455*, page 646.
- TSUJI, T. (2000), “Water on the Early M Supergiant Stars  $\alpha$  Orionis and  $\mu$  Cephei,” in *ApJ volume 538*, pages 801–807.
- WEDEMEYER-BÖHM, S., I. KAMP, J. BRULS, & B. FREYTAG (2005), “Carbon monoxide in the solar atmosphere. I. Numerical method and two-dimensional models,” in *A&A volume 438*, pages 1043–1057.
- WISHART, A. W. (1979), “The bound-free photo-detachment cross-section of H<sub>2</sub>,” in *MNRAS volume 187*, pages 59P–610P.
- ZIURYS, L. M., S. N. MILAM, A. J. APPONI, & N. J. WOOLF (2007), “Chemical complexity in the winds of the oxygen-rich supergiant star VY Canis Majoris,” in *Nature volume 447*, pages 1094–1097.